

THESE

En vue de l'obtention du : **DOCTORAT**

Structure de Recherche : Physique des Hautes Énergies-Modélisation et Simulation.

Discipline : Physique.

Spécialité : Physique des Nouveaux Matériaux et Modélisation des Systèmes.

Présentée et soutenue le 08/10/2022 par :

-Mohamed SAAOUD

**Contribution à l'étude par dynamique moléculaire de la réponse
Thermomécanique de matériaux bidimensionnels multicouches à
base de groupe III et groupe IV.**

JURY

El Hassan SAIDI	PES, Université Mohammed V, Faculté des Sciences- Rabat.	Président
Fatima SAHBAN	PES, Université Mohammed V, Faculté des Sciences- Rabat.	Rapporteur/ Examineur
Khadija HTOUTOU	PH, CRMEF de Fès-Meknès,	Rapporteur/ Examineur
Rachid AHL LAAMARA	PH, Université Mohammed V, Faculté des Sciences-Rabat.	Rapporteur/ Examineur
Haddou EL GHAZI	PH, Université Hassan II, ENSAM-Casablanca.	Examineur
Ilham ABERDANE	PA, Université Mohammed V, Faculté des Sciences-Rabat.	Invité
Lalla Btissam DRISSI	PES, Université Mohammed V, Faculté des Sciences-Rabat.	Directrice de thèse

Année Universitaire : 2021/2022

*« Your state will come like waves.
When the tide is low, hold on.
It will always rise again. »*

Yasmin Mogahed

Remerciement

Les travaux de recherche présentés dans cette thèse doctorale ont été effectués au sein du Laboratoire de Physique des Hautes Energies-Modélisation et Simulation (LPHE-MS) du département de physique de l'université Mohammed V-Rabat, Faculté des Sciences, avec le concours de l'Académie Hassan II des Sciences et Techniques et sous la direction et l'encadrement de Madame **DRISSI Lalla Btissam**, Professeur de l'enseignement supérieur à la faculté des Sciences de Rabat.

Mes premiers remerciements vont bien sûr à Madame **DRISSI Lalla Btissam**, Professeur de l'Enseignement Supérieur à la Faculté des Sciences de Rabat qui a été durant ces années bien plus qu'une encadrante. Elle a su me guider au début, et me laisser de plus en plus de liberté ensuite, marquant sa présence sur la fin par son intérêt vif et ses remarques toujours pertinentes. Son enthousiasme profond pour la recherche, complété d'une grande connaissance de toutes ses facettes, m'ont permis d'avoir une démarche équilibrée et de ne négliger aucune opportunité. J'ai beaucoup appris auprès d'elle, son intuition scientifique et le sens de la direction ont su orienter mes travaux.

Je suis redevable à Monsieur **SAIDI El Hassan**, Professeur de l'Enseignement Supérieur à la Faculté des Sciences de Rabat qui m'a accueilli dans son laboratoire à l'Université Mohammed V de Rabat, dont la rigueur m'a toujours inspirée à travailler d'avantage durant mes années de master, aussi pour son enseignement, son soutien, son aide, sa disponibilité, et ses grandes qualités humaines. Merci beaucoup d'avoir accepté de présider le jury et me faire l'honneur de participer à cette soutenance.

Je remercie vivement Madame **SAHBAN Fatima**, Professeur de l'Enseignement Supérieur à la Faculté des Sciences de Rabat, de m'avoir fait l'honneur de participer au jury de ma soutenance en tant que rapporteur.

Mes remerciements chaleureux s'adressent à Madame **HTOUTOU Khadija**, Professeur habilitée au Centre Régional des Métiers de l'Education et de la Formation de Fès-Meknès, pour avoir accepté de rapporter mon travail de recherche et de faire partie du jury de thèse.

Je remercie également Monsieur **AHL LAAMARA Rachid**, Professeur habilité à la Faculté des Sciences de Rabat, qui depuis mes années de master à toujours su me remonter le moral dans les moments où j'avais du mal à avancer avec ses conseils et sa grande sympathie. Merci beaucoup d'avoir accepté de participer à ce jury en tant que rapporteur. Soyez assuré, Monsieur, de ma profonde gratitude.

Un grand merci à Monsieur **EL GHAZI Haddou**, Professeur habilité à l'École Nationale Supérieure des Arts et Métiers de Casablanca, pour avoir accepté d'être membre du jury en tant que examinateur et pour avoir évalué ce travail.

Par la même occasion, je suis également reconnaissante à Madame **ABERDANE Ilham**, Professeur Assistant à la Faculté des Sciences de Rabat, qui a bien voulu faire partie de mon jury

Je remercie énormément tous les membres du jury pour leur disponibilité le jour de ma soutenance, pour le privilège qu'ils m'ont accordé par leur présence et pour l'intérêt qu'ils ont attribué à mon mémoire de thèse. Je tiens à vous remercier encore une fois d'avoir accepté de vous déplacer pour partager avec moi l'un des moments les plus mémorables de toute ma vie. Ces moments qui risquent de créer un événement inoubliable pour le reste de mes jours.

Grand merci au Docteur **Sadki Kawtar**, qui m'a encouragé à apprendre à utiliser le code LAMMPS à mes débuts.

Je remercie l'ensemble de l'équipe de recherche du LPHE-MS pour les nombreuses et toujours fructueuses discussions. Travailler avec eux a été un réel plaisir que du bonheur.

Ne pouvant malheureusement pas citer toutes les personnes que j'ai rencontré durant mon parcours et qui ont pu contribué d'une façon ou d'une autre, de près ou de loin, à l'aboutissement de cette thèse, je leur dis à toutes merci d'avoir été là à cette instant précis où je les ai rencontrées et où ils m'ont apportée cette aide qui a surement contribué à aller au bout de cette thèse.

Enfin, je remercie toutes celles et tous ceux qui m'ont accompagné et soutenu tout au long de ce parcours, notamment mes parents, mes frères, sans leur appui, la réalisation de ce travail n'aurait pas été possible. Je ne saurai exprimer mes sincères sentiments de reconnaissance à toute ma famille.

À la mémoire de mon grand frère Kamal
Puisse Dieu l'accueillir dans son infinie Miséricorde
À mes très chers parents
À mes très chers frères Abdellatif et Youssef
À tous ceux qui m'ont aidée
À tous ceux qui m'ont soutenue de près ou de loin
À tous ceux qui ont cru en moi
À tous ceux qui m'ont faits confiance
À tous ceux qui ont supporté mes questions incessantes
Je vous dédie ce mémoire avec toute la grâce du monde

Résumé

Cette thèse est une contribution à l'étude de la réponse thermomécanique et des propriétés intrinsèques et extrinsèques de certaines classes de matériaux bidimensionnels en particulier, les matériaux hybrides à base de silicène, de borophène et de monochalcogénures, par la dynamique moléculaire. À ce propos, Nous avons focalisé sur le comportement élastique des nanomatériaux qui est la base de la détermination des propriétés mécaniques telles que, le module de Young, le coefficient de Poisson, la résistance à la traction et la déformation de rupture. À la lumière du rôle critique de la gestion de la température dans les nanodispositifs et dans le contrôle des performances et de la stabilité de ces dispositifs, nous avons débattu de l'influence d'une large gamme de température sur les propriétés thermomécaniques et structurales de ces matériaux hybrides. Afin de maximiser la fonctionnalité des matériaux 2D, une compréhension approfondie et une manipulation précise des défauts s'impose. Dans ce sens, nous abordons plusieurs types des défauts tels que les fissures et les nanopores qui influencent les propriétés intrinsèques des matériaux. Une attention particulière a été apportée aux stratégies d'ingénierie des contraintes pour réduire les dommages qu'ils causent par les défauts précités, et améliorer leurs propriétés mécaniques, afin d'en tirer profit. Toutes nos contributions dans le domaine ont montré des résultats avec un impact significatif, ce qui ouvre la porte vers une utilisation dans des applications extensibles et de futurs dispositifs thermomécaniques.

Mots-clés : 2D-SiC, 2D-SiGe, monochalcogénures monocouches, borophène, propriétés thermomécaniques, constantes élastiques, fissures, nanopores, dynamique moléculaire.

Abstract

This thesis is a contribution to the study of the thermomechanical response and the intrinsic and extrinsic properties of some classes of two-dimensional materials in particular, hybrid materials based on silicene, borophene and monochalcogenides, by molecular dynamics. In this regard, we focused on the elastic behavior of nanomaterials which is the basis for the determination of mechanical properties such as, Young's modulus, Poisson's ratio, tensile strength and failure strain. In light of the critical role of temperature management in nanodevices and in controlling the performance and stability of these devices, we discussed the influence of a wide temperature range on the thermomechanical and structural properties of these hybrid materials. In order to maximize the functionality of 2D materials, a thorough understanding and accurate manipulation of defects is required. In this sense, we address several types of defects such as cracks and nanopores that influence the intrinsic properties of the materials. Particular attention has been paid to stress engineering strategies to reduce the damage caused by the aforementioned defects, and to improve their mechanical properties, in order to benefit from them. All our contributions in this area have shown results with significant impact, which opens the door to use in scalable applications and future thermomechanical devices.

Keywords : 2D-SiC, 2D-SiGe, monolayer monochalcogenides, borophene, thermomechanical properties, elastic constants, cracks, nanopores, molecular dynamics (MD).

Table des matières

Introduction générale	1
I Propriétés élastiques des matériaux	7
1 Modules élastiques	7
1.1 Module de Young et coefficient de Poisson	8
1.2 Modules de cisaillement et d'élasticité isostatique	9
1.3 Diagramme contrainte-déformation	12
2 Loi de Hooke	13
2.1 Généralités	13
2.2 Symétries des souplesses et rigidités	14
2.3 Effets de la symétrie du matériau	16
3 Mécanique de la rupture	18
3.1 Contraintes Vs fissures	18
3.2 Mécanique linéaire élastique de la rupture (MLER)	19
3.2.1 Critère de l'énergie	19
3.2.2 Critère du facteur d'intensité de contrainte	21
3.3 Mécanique élasto-plastique de la rupture	23
3.3.1 Modèle de Dugdale	23
3.3.2 Modèle de Barenblatt	24
3.3.3 Intégrale-J à deux dimensions	25
4 Conclusion	26
II Simulations par la dynamique moléculaire (DM)	29
1 Méthodologie de simulation	29
1.1 Organigramme du programme DM	29
1.2 Contrôle de la température	30
1.3 Condition périodique aux limites et principe de la simulation	32
2 Potentiels interatomiques	34
2.1 Potentiel de Lennard-Jones	34
2.2 Potentiel de Stillinger-Weber	36
2.3 Potentiel de Tersoff	39
3 Intégration des équations du mouvement	40

3.1	Méthode d'Euler	41
3.2	Méthodes du Point Médian et Demi-Pas	42
3.3	Méthode de Leapfrog Verlet	43
4	Observables et caractérisation	47
5	Conclusion	49

III Structures et propriétés mécaniques des nanomatériaux bidimensionnels 51

1	Matériaux à base de carbone	51
1.1	Allotropes de carbone à 3 dimensions	52
1.1.1	Graphite	52
1.1.2	Diamant	53
1.1.3	Lonsdaléite	53
1.2	Graphène	54
1.3	Dérivées de graphène à dimension 0 et 1	57
1.3.1	Fullerène	57
1.3.2	Nanotube de carbone	58
2	Hybrides SiC et SiGe	59
2.1	Structure cristallographique	60
2.2	Module élastique	62
2.3	Synthèse de SiC	63
3	Borophène hexagonale à 2 dimension	65
3.1	Propriétés structurales	65
3.2	Propriétés mécaniques	66
3.3	Synthèse du borophène	68
3.3.1	Synthèse sur Ag(111)	70
3.3.2	Synthèse par exfoliation en phase liquide	72
4	Matériaux hybrides à base des groupes III-VI	73
4.1	Structures et réseaux	74
4.2	Réponse élastique	74
4.3	Fabrication par PVD et Épitaxie	77
5	Conclusion	79

IV Contributions et Résultats 81

1	Réponse élastique de matériaux hexagonaux	82
1.1	Élasticité linéaire	82
1.2	Effet de la température et de vitesse de déformation	87
1.3	Contribution I	93
2	Influence de défauts sur le comportement élastique	106

2.1	Défauts ponctuels	106
2.2	Fissures	113
2.3	Contribution II	118
3	Contrainte de traction ultime via des configurations pores/fissures auxiliaires	129
3.1	Amélioration des fissures	129
3.2	Comparaison entre les techniques d'amélioration	133
3.3	Contributions III et IV	134
4	Conclusion	147
	Conclusion générale et perspectives	149
	Bibliographie	151

Table des figures

I.1	Illustration de l'application d'une contrainte σ et d'une déformation ε à un matériau élastique.	8
I.2	Déformation transversale $\varepsilon_{\text{trans}}$ et axiale $\varepsilon_{\text{axiale}}$ d'un matériau conventionnel	9
I.3	Représentation schématique (a) matériau auxétique (b) matériau conventionnel	10
I.4	Représentation d'un objet soumis à une contrainte de cisaillement . . .	11
I.5	Illustration de la compression uniforme	12
I.6	Courbe contrainte-déformation. Domaine élastique et domaine plastique	12
I.7	La distribution des contraintes autour d'un trou elliptique dans une plaque infiniment grande soumise à une tension uniforme σ_0	19
I.8	Une plaque infiniment grande avec une fissure de longueur $2a$ soumise à une tension uniforme normale au plan de la fissure.	21
I.9	Répartition des contraintes devant un fond de fissure selon la théorie de l'élasticité.	22
I.10	Les différents modes de sollicitation [78].	22
I.11	Schéma du modèle Dugdale.	24
I.12	Front de fissure pour la définition de l'intégrale-J	26
II.1	Organigramme d'un programme typique de dynamique moléculaire . . .	30
II.2	Les différents ensembles utilisés dans les simulations par la DM	32
II.3	Représentation schématique des conditions aux limites périodiques dans les simulations par la DM	33
II.4	Graphique de la fonction potentielle de Lennard-Jones	35
II.5	Un scénario similaire à celui qui se déroule dans les atomes et molécules neutres et qui est souvent décrit par le potentiel de Lennard-Jones. . .	36
II.6	Potentielle de Lennard-Jones avec la présentation de la force des interactions.	37
II.7	Représentation schématique des étapes de l'algorithme de Verlet. . . .	44
II.8	Représentation schématique de l'algorithme de Leapfrog Verlet.	48

III.1	Diagramme schématique de (a) Graphite natif et (b) Structure du graphite.	52
III.2	Diagramme schématique de (a) diamant synthétique et (b) Structure du diamant	53
III.3	Diagramme schématique de (a) Diamant hexagonal lonsdaléite et (b) Structure cristalline	54
III.4	Structure géométrique de la graphène monocouche, (a) vue de dessus et (b) vue de section transversale	55
III.5	Maille hexagonale formée par les atomes de carbone dans le graphène monocouche. a_i désignent les vecteurs de la cellule primitive. b) Première zone de Brillouin, b_i désigne les vecteurs du réseau réciproque. Extraite de [153]	55
III.6	Courbes de contrainte-déformation du graphène sans défaut. Extraite de [156]	57
III.7	Structure du fullerène C_{60}	58
III.8	Structure des nanotubes de carbone : (a) chaise, (b) zigzag et (c) chiral	59
III.9	Schéma représentant la structure cristallographique du carbure de silicium a) vue de dessus et (b) vue de section transversale	61
III.10	Structure géométrique de la feuille du silicium-germanium a) vue de dessus et (b) vue de section transversale	61
III.11	Approches de synthèse pour les nanoparticules (a) approches "bottom-up" et (b) approches "top-down"[188].	64
III.12	Photographies du processus d'exfoliation de SiC [197].	65
III.13	Modèles de structure en vue de dessus (a-d) et de côté (e-h) de 2- $Pmmn$, β_{12} , χ_3 et borophène de type graphène sur le substrat Ag/Al(111) [33, 206, 207].	66
III.14	Une vu (a) de haut et (b), (c) de profil de la structure cristallographique plissée correspondant au 2- $Pmmn$ borophène.	67
III.15	Structure du bore 3D, dont les unités structurales sont combinées par des liaisons complexes.	69
III.16	La principale méthode de synthèse des nanofeuilles 2D. a) Méthode "Bottom-up" : CVD, PVD, et chimie humide. b) Méthode "top-down" : clivage mécanique, ultra sonication, exfoliation par intercalation d'ions, gravure sélective et gravure par oxydation thermique [240].	71

III.17	Synthèse et caractérisation du borophène a) Schéma de la synthèse du borophène sur l'argent. b) Structure du borophène prédite par ordinateur. c-h) Images dI/dV en boucle fermée du borophène à droite et topographie STM à grande échelle du borophène à gauche, montrant une couverture faible (c,d), moyenne (e,f) et élevée (g,h) [33].	72
III.18	a) Schéma de la synthèse des exfoliations en phase liquide assistée par sonication de borophènes de haute qualité. b-g) Caractérisation AFM du borophène synthétisé dans le DMF (b-d) et l'IPA (e-g) par sonication. b,e) Images topographiques AFM et profils d'altitude. c,f,d,g) Épaisseur et taille du borophène préparé. [37]	73
III.19	Vues de dessus (a) et de côté [(b) et (c)] de la structure de la monocouche MX (GaSe et InSe).	74
III.20	Courbes de contrainte-déformation d'une feuille d'InSe monocouche sous déformation par tension uniaxiale dans les directions armchair et zigzag à des températures de 1 K et 300 K [47].	76
III.21	Relations contrainte-déformation pour la monocouche GaSe étirée uniaxialement le long des directions armchair et zigzag à des températures de 1 K et 300 K. [109].	77
III.22	Couches InSe synthétisées via la méthode PVD en utilisant la poudre InSe comme précurseur. Une tranche de SiO_2/Si a été utilisée comme substrat.[267].	78
III.23	(a-b) Image au microscope électronique à balayage (MEB) de flocons In_2Se_3 cultivés respectivement sur graphène et du mica. (c) Image schématique illustrant la croissance de la zone sélective d' In_2Se_3 par gravure au plasma d'oxygène. (d) Image optique de flocons In_2Se_3 structurées, cultivés sur mica modifié. (e) Image optique de nanofeuilles de GaSe cultivées sur mica. (f-g) Image optique de réseaux de GaSe par croissance sélective. (h) Image schématique illustrant le processus d'impression en taille-douce. (i) Image optique de cristaux de Bi_2Se_3 cultivés sur mica à différentes étapes.[255]	79
IV.1	Courbes de contrainte-déformation sous tension uniaxiale dans les directions armchair et zigzag à température ambiante pour une feuille de graphène, un hybride de SiC et une monocouche de SiGe.	83
IV.2	Courbes de contrainte-déformation sous tension uniaxiale dans les directions armchair et zigzag à température ambiante pour un borophène multicouche	83
IV.3	Courbes de contrainte-déformation sous tension uniaxiale dans les directions armchair et zigzag pour oxyde de bore hexagonal 2D	84

IV.4	Courbes de contrainte-déformation sous tension uniaxiale dans les directions armchair et zigzag pour une feuille de tellure d'indium (InTe).	84
IV.5	Effet de la température sur la résistance à la rupture et la déformation à la rupture dans les directions zigzag et armchair, respectivement pour les cas des feuilles a, b de graphène, c, d de SiC et e, f de SiGe.	89
IV.6	Effet de la température sur la résistance à la rupture du borophène multicouche dans les directions armchair et zigzag.	89
IV.7	Variations de la résistance à la rupture et de la déformation à la rupture d'une feuille BO monocouche en fonction de la température pour une charge directionnelle en armchair et en zigzag.	90
IV.8	Effets de la température sur le module de Young de BO monocouche sous tension uniaxiale dans les orientations armchair et zigzag.	91
IV.9	Variation de la résistance à la rupture et de la déformation à la rupture des feuilles de SiC et de SiGe, respectivement, en fonction de la vitesse de déformation à différentes températures.. . . .	92
IV.10	La variation de la résistance à la rupture du borophène multicouche en fonction de la vitesse de déformation à différentes températures dans la direction armchair.	93
IV.11	Illustration d'un matériau hybride 2D du groupe IV, avec une concentration de 2 % de mono-lacune.	107
IV.12	a) Résistance à la rupture et b) Déformation à la rupture des feuilles défectueuses dans le sens armchair.	107
IV.13	Structure cristalline des défauts à simple lacune (SV) et à double lacune (DV) dans le borophène monocouche.	108
IV.14	Module de Young du borophène multicouche en fonction de la concentration des défauts de lacunes le long des directions zigzag et armchair.	108
IV.15	Résistance à la rupture du borophène multicouche pur et défectueux en fonction des concentrations de défauts de lacune le long des directions armchair et zigzag.	109
IV.16	Résistance à la rupture par rapport au pourcentage de défauts de mono-lacune et de bi-lacune pour le chargement le long de (a) la direction zigzag et (b) la direction armchair.	110
IV.17	(a) mono-lacune et (b) bi-lacune monocouche BO défectueuse , où m_{zig} et m_{arm} sont la largeur de défaut de la mono-lacune, tandis que b_{zig} et b_{arm} sont ceux correspondant à la bi-lacune.	111
IV.18	Effets de la concentration des défauts (mono-lacune ou bi-lacune) sur le module de Young de la monocouche BO sous tension uniaxiale le long des orientations armchair et zigzag.	111

IV.19	Variation de l'énergie de formation en fonction de (a) la concentration de défauts mono-lacune et (b) bi-lacune dans une feuille de BO. . . .	112
IV.20	Variations de la contrainte de rupture en fonction du diamètre des pores de la feuille BO sous tension uniaxiale selon les directions zigzag et armchair.	113
IV.21	Illustration du processus de déformation et de la distribution des contraintes de la monocouche poreuse InTe à 300K le long de la charge directionnelle (i) zigzag (axe y) (ii) armchair (axe x).	114
IV.22	Coordonnées initiales de la monocouche 2D- $M^{III}X^{VI}$ pré-fissurée. (a) Fissure dans la direction armchair. (b) Fissure dans la direction zigzag.	115
IV.23	Variations de la résistance à la rupture et de la déformation de rupture en fonction de la longueur de la fissure d'une feuille de BO pour une charge directionnelle en armchair et en zigzag.	115
IV.24	Processus de déformation et distribution des contraintes d'une feuille de BO pré-fissurée de 4 nm à 300K sous une charge uniaxiale dans (a) l'axe armchair et (b) l'axe zigzag.	116
IV.25	Variations de la contrainte de rupture en fonction de la longueur de la fissure d'un nanofeuille InTe sous tension uniaxiale dans les directions zigzag et armchair.	117
IV.26	Illustration du processus de déformation et de la distribution des contraintes d'une monocouche pré-fissurée InTe à 300K le long (i) d'un chargement directionnel en zigzag (axe y) (ii) d'un armchair (axe x).	118
IV.27	Structure atomique typique d'une monocouche d'InTe. (a) fissure en armchair avec pores (b) fissure en zigzag avec pores (c) fissure en armchair avec fissures auxiliaires (d) fissure en zigzag avec fissures auxiliaires.	129
IV.28	Amélioration des fissures avec la coopération des pores (a) chargement le long de la direction zigzag (b) chargement le long de la direction de l'armchair.	130
IV.29	Distribution des contraintes (a) pour une charge le long de la direction en zigzag (i) fissure seulement (ii) position du pore 1 (iii) position du pore 2 (iv) position du pore 3 (v) position du pore 4 à une déformation de 6.5% et (b) pour une charge le long de la direction en armchair (i) fissure seulement (ii) position du pore 1 (iii) position du pore 2 (iv) position du pore 3 (v) position du pore 4 à une déformation de 5%. .	131
IV.30	Amélioration des fissures avec la coopération de fissures auxiliaires (a) chargement dans la direction zigzag (b) chargement dans la direction armchair.	132

IV.31	Distribution des contraintes pour un chargement le long de la direction armchair (a) fissure uniquement (b) position de fissure auxiliaire 2 (c) position de fissure auxiliaire 4 à 5.5 % de déformation.	133
IV.32	Vecteurs de déplacement des atomes autour de la pointe de la fissure avant la rupture pour une feuille d'InTe contenant (a) aucune fissure auxiliaire, (b) une fissure auxiliaire en position 2 (c) une fissure auxiliaire en position 4.	133
IV.33	Les courbes contrainte-déformation pour la comparaison entre le système fissure-pore et fissure-fissure auxiliaire pour (a) chargement dans la direction zigzag à 1K (b) chargement dans la direction armchair à 1K (c) chargement dans la direction zigzag à 300K (d) chargement dans la direction armchair à 300K.	134

Liste des tableaux

III.1	Propriétés mécaniques simulées du graphène parfaite.	57
III.2	Constantes de réseau a et b, écart de hauteur h, énergie cohésive E_c calculées pour trois structures de borophène [226].	67
III.3	Constante de réseau calculée (a), longueur de liaison de M-X (d), M-M (L), et épaisseur entre les couches X supérieure et inférieure (h) de la structure de monocouche MX (InSe, GaSe, BO, et InTe)	75
IV.1	Grandeurs élastiques de matériaux 2D asymétriques à 300 K dans les directions zigzag/armchair.	83
IV.2	Distances intercouches d en Å, module de Young Υ et résistance σ en GPa, déformation à la rupture ε en (%) pour le borophène multicouche le long des deux directions armchair (-y) et zigzag (-x).	87
IV.3	Module de Young Υ en GPa pour le borophène multicouche intercalé par des atomes d'azote le long des deux directions armchair (-y) et zigzag (-x).	88

liste des abréviations

Grandeurs	Nomenclature	Unité
E ou Υ	Module de Young	Pa
σ	Contrainte normale	Pa
ε	Déformation longitudinale	%
ν	Coefficient de Poisson	Sans dimension
G	Module de rigidité	Pa
B	Module de compressibilité	Pa
s	Contrainte isostatique	Pa
e	Déformation isostatique	Sans dimension
K	Compressibilité	Pa^{-1}
[C]	Tenseur de rigidités	$N \cdot m^{-1}$
[S]	Tenseur de souplesses	$m \cdot N^{-1}$
σ_0	Force motrice	Pa
σ_{yy}	Contrainte de traction autour du défaut	Pa
ρ	Rayon de courbure	m
G_{1c}	Énergie critique	$J \cdot m^{-2}$
σ_c	Résistance à la rupture	Pa
γ	Énergie de surface	$J \cdot m^{-2}$
γ_P	Énergie plastique par unité d'extension de fissure	$J \cdot m^{-2}$
K_1	Facteur d'intensité de contrainte en mode I	MPa $\sqrt{m}$
K_0	Module de cohésion	MPa $\sqrt{m}$
n	Nombre d'atomes dans un système parfait	Sans dimension
K_B	Constante de Boltzmann	$J \cdot K^{-1}$
E_{coh}	Énergie de cohésion par atome	eV
$E_{parfait}$	Énergie totale d'un matériau parfait	eV
DM	Dynamique moléculaire	Sans dimension
DFT	Théorie de la fonctionnelle de la densité	Sans dimension

Introduction générale

La physique de la matière condensée qui explore les propriétés macroscopiques et microscopiques de la matière [1], se manifeste en deux catégories : la condensée "dure", qui étudie les propriétés quantiques de la matière, et la physique de la matière condensée "molle", qui étudie le comportement de la matière sans faire appel à la mécanique quantique [2], mais plutôt à d'autres méthodes analytiques et de simulations numériques basées sur la mécanique classique. Les simulations à base de la dynamique moléculaire, qui est une méthode de simulation informatique permettant d'analyser les mouvements physiques des atomes et des molécules en fait partie.

Les atomes et les molécules interagissent pendant une période de temps fixe, donnant une vue de l'évolution dynamique du système. En général, les trajectoires des atomes et des molécules sont déterminées en résolvant numériquement les équations du mouvement de Newton pour un système de particules en interaction, où les forces entre les particules et leurs énergies potentielles sont souvent calculées à l'aide de potentiels interatomiques ou les champs de force de la mécanique moléculaire [3, 4]. La simulation par la dynamique moléculaire fournit la méthodologie pour une modélisation microscopique détaillée à l'échelle moléculaire, dont la dynamique est contenue dans la solution du problème à N-corps. Or le problème classique à N-corps n'a pas de solution analytique générale, mais l'usage de la voie numérique tel que l'approche de la dynamique moléculaire permet de suivre le mouvement des molécules individuelles [5].

L'étude des propriétés structurales révèle plusieurs informations sur le matériau considéré telles que, le caractère des liaisons atomiques et le degré de connectivité de la structure. La stabilité mécanique des structures cristallines est une exigence nécessaire et obligatoire pour la fabrication des matériaux. Elle est fournie par les paramètres élastiques tel que le module de Young, le coefficient de Poisson, le module de cisaillement et le module de compression. Ces paramètres permettent également d'explorer d'autres propriétés du matériau, notamment l'élasticité, la solidité, la ductilité, et l'anisotropie aussi bien que la nature des forces agissant dans les solides, en particulier les nanomatériaux 2D, qui font l'objet de cette thèse.

Depuis l'isolement du graphène à partir du graphite en 2004 par Geim et Novoselov [6], les matériaux bidimensionnels (2D) ont suscité une énorme attention au cours de la dernière décennie en raison de leurs propriétés uniques telles que les propriétés mécaniques. Malgré leur ultra-minceur et leur faible poids par rapport à leurs homologues en

3D, certains matériaux 2D se caractérisent par un module de Young et une résistance élevés. Notamment le module élastique intrinsèque du graphène (module de Young de 1 TPa et résistance maximale supérieure à ~ 100 GPa à la contrainte de rupture de $\sim 25\%$) a été observé par la technique de nanoindentation utilisant la microscopie à force atomique (AFM) [7, 8], et confirmée par la suite dans d'autres études théoriques et expérimentales [9, 10]. La résistance mécanique et la ténacité exceptionnelles du graphène ont accru les attentes des scientifiques des matériaux concernant le rôle potentiel de ce nouveau matériau 2D dans la fabrication de composants de renforcement ou de dispositifs et capteurs électroniques flexibles [11, 12]. Les résultats diversifiés obtenus pour le graphène, ont permis à étendre les investigations pour inclure plus de matériaux 2D. Cependant, les études sur les propriétés thermomécaniques doivent encore être mieux comprises pour pouvoir être utilisées dans de futures applications, ce qui laisse de nombreux défis à relever.

Parmi les matériaux 2D qui ont sollicités un grande intérêt, nous citons les monocouches en nid d'abeille qui sont composées des atomes du groupe IV du tableau périodique, à savoir le silicène et le germanène. La synthèse du silicène pure [13] et du germanène [14] a été déjà réalisée et a révélé que contrairement à la monocouche de graphène planaire, les monocouches de silicène et de germanène les plus stables ne peuvent exister qu'en structure légèrement plissée (LB) [14–16]. Comparé à son homologue le Silicium 3D, la résistance à la rupture et la déformation à la rupture du silicène sont beaucoup plus élevées, bien que le module de Young du silicène soit inférieur à celui du silicium 3D. Par ailleurs une augmentation de la température diminue de manière significative la résistance à la rupture et la déformation à la rupture du silicène, tandis qu'une augmentation de la vitesse de déformation les améliore légèrement [17]. Pour le germanène, ses propriétés mécaniques présentaient une anisotropie évidente dans différentes directions. De plus, il a été vérifié que les propriétés mécaniques, y compris la rigidité et la résistance des feuilles de germanène, étaient significativement influencées par des défauts à la surface du germanène. Lorsque le paramètre de défaut était supérieur à une valeur critique, la résistance des feuilles de germanène était considérablement réduite [18].

L'hybridation du silicène avec ses analogues de la colonne IV tel que le carbone ou le germanium a conduit à une nouvelle classe de matériaux noté SiC ou SiGe qui combinent à la fois les propriétés du silicène avec celles des autres constituant donnant lieu à de nouvelles propriétés très souhaitables pour les applications nanotechnologiques [19–21]. À la différence du graphène, le silicène et le germanène, le silicène-graphène (SiC) et le silicène-germanène (SiGe) sont des semi-conducteurs avec un gap direct [22, 23]. Le SiC a été produit en utilisant la méthode d'exfoliation liquide d'un SiC wurtzite d'une épaisseur allant de 0.5 jusqu'à 1.5 nm [24]. Il a également été synthétisé avec

succès par réaction entre une poudre de graphène et du silicium à haute température [25]. En ce qui concerne les propriétés mécaniques, SiGe et SiC présentent des valeurs de paramètres élastiques particulières. Le SiGe est difficile à briser parmi les autres monocouches (2D) du groupe IV telles que SiSn et SnGe. [26]. Comparé au graphène, l'hybride SiC est moins rigide et deux fois plus résistant [27, 28]. Le passage de la monocouche SiC à la bicouche induit une flexibilité supplémentaire en hybride [29]. Pour les hybrides SiC, les calculs par la dynamique moléculaire (DM) rapportent un module de Young de 174 à 169.6 N/m dans la direction zigzag et de 171 à 173.4 N/m dans la direction "armchair" [30, 31]. A haute température, des ondulations excitées thermiques intrinsèques sont observées dans les hybrides hexagonaux [32]. En outre, des feuilles de SiC et de SiGe, montrent que la contrainte et la déformation à la rupture dans la direction zigzag sont supérieures à celles le long de l'axe "armchair" [15].

Le borophène du groupe 2-*Pmmn*, est un autre candidat de la liste 2D, cette feuille de bore 2D est structurellement similaire au graphène avec un atome de bore supplémentaire au centre de l'hexagone. Bien que le borophène soit un matériau monocouche, le borophène bi-couche et le borophène à plusieurs couches ont également sollicité un attention considérable [34, 35]. Depuis la synthèse de borophène monocouche par procédé chimique [33] et du borophène bi-couche par épitaxie par faisceau moléculaire [36], des échantillons de borophène avec différents nombres de couches ont été préparés en utilisant exfoliation en phase liquide [37]. Contrairement à d'autres matériaux 2D, le borophène présente une caractéristique métallique, et peut donc être utilisé comme électrode et interconnexion dans des nanodispositifs flexibles [38]. De telles applications impliquent inévitablement des conditions de service qui introduisent des variations de la température et de la déformation.

D'autres éléments qui ont été suscités un intérêt croissant en raison de leurs propriétés optoélectroniques particulières telles qu'une mobilité élevée des porteurs, une densité de charge élevée et une caractéristique électronique de type p [39–41] sont les composés binaires des groupes III-VI. Aussi bien, divers composés hexagonaux du groupe III-VI $M^{III}X^{VI}$, dont GaS [42, 43], GaSe [44], GaTe [45] et InSe [46], ont été synthétisés expérimentalement. Les études entamées ont démontré que l'InSe 2D présente une remarquable déformation en traction de 27% le long de la direction zigzag pour une température ambiante de 300 K, en plus d'une diminution significative de ses paramètres mécaniques lorsque la température augmente [47]. Pour InSe sa longueur augmente la valeur de la conductivité thermique (k), tandis que l'augmentation de la température et le nombre de sites vacantes la diminuent [48]. Par ailleurs, la monocouche de BO se révèle plus flexible à la déformation mais elle est plus difficile à briser par rapport à d'autres matériaux hexagonaux bidimensionnels comme le MoS_2 , le phosphorène et le β -bismuthène [49]. Des fissures de longueurs différentes ont un

impact considérable sur le comportement à la rupture de la nano-feuille de BO, alors que l’allongement des fissures n’a aucune influence sur le module de Young [49].

Il découle que la caractéristique ultra-mince, les matériaux 2D constituent des blocs de construction prometteurs pour les dispositifs électroniques et optoélectroniques de nouvelle génération. Cependant la réduction de la dimensionnalité de 3D à 2D, les défauts inévitables joueront un rôle plus important dans la détermination des propriétés des matériaux. Afin de maximiser la fonctionnalité des matériaux 2D, une compréhension approfondie et une manipulation précise des défauts s’impose. Ces dernières années, beaucoup d’effort a été consacré à l’observation, la compréhension, la manipulation et le contrôle des défauts dans les matériaux 2D [50–54], surtout par les défauts multi-atomiques tels que les fissures et les pores peuvent compromettre gravement les propriétés mécaniques. De tels défauts sont inévitables dans de nombreuses situations et ils sont souvent délibérément imprimés aux nanostructures pour obtenir les propriétés souhaitées, notamment en termes de propriétés électriques et optiques, voire pour améliorer la stabilité mécanique de certains nanomatériaux [55–58]. Dans [59], il a été démontré que l’augmentation de la densité des défauts affecte fortement les propriétés du matériau, alors qu’une augmentation de la longueur des fissures réduit les propriétés de rupture du matériau. De plus l’induction d’une certaine quantité de lacunes autour des zones spécifiques d’un échantillon pré-fissuré peut améliorer la résistance du matériau. Pour MoS_2 pré-fissuré, ses propriétés mécaniques peuvent être améliorées par des pores et des fissures auxiliaires placés symétriquement autour d’une fissure centrale et la position de ces arrangements peut être optimisée pour une amélioration maximale de la résistance [60]. Ainsi, le contrôle des défauts des matériaux 2D pour améliorer les performances des dispositifs en général ou pour utiliser les défauts de manière contrôlée dans de nouvelles applications est devenu cruciale et a attiré beaucoup d’attention.

Ce travail de thèse basé sur la simulation par la dynamique moléculaire, est une contribution à l’étude des propriétés intrinsèques des matériaux bidimensionnels principalement les composés binaires. A cet effet, nous nous intéressons aux aspects structuraux et thermomécaniques de ces matériaux et à l’effet des défauts sur leurs propriétés. Le travail est exposé en quatre chapitres.

Le premier chapitre est réservé aux notions de base du comportement élastique des matériaux, tels que le module de Young, le coefficient de Poisson, le module de cisaillement, le module d’élasticité isostatique. Ce chapitre détermine également les constantes élastiques pour différents matériaux en fonction de la symétrie de leur maille élémentaire. Quelques approches de mécanique de la rupture prenant compte l’existence de défauts en modes linéaire élastique et élasto-plastique fait également l’objet de ce chapitre.

Le deuxième chapitre est consacré à une présentation de la méthode utilisée pour la

réalisation de nos simulations notamment la dynamique moléculaire. Nous donnerons tout d'abord les différents types des potentiels interatomiques utilisés au cours de cette thèse puis, nous listerons en détails les différents algorithmes afin de simplifier la résolution numérique des équations du mouvement. Les observables de base extraites de nos simulations seront discutées puisqu'elles permettent d'obtenir des informations complètes sur les états de systèmes.

Les résultats de la littérature relative aux matériaux 2D à structures cristallines hexagonales tel que le graphène et ses allotropes et certains matériaux à base de silicium ainsi que le borophène, InSe et GaSe seront abordés dans l'avant dernier chapitre de cette thèse. Une explication détaillée de leurs propriétés structurales et mécaniques est donnée. De plus, l'effet de la température et des défauts structuraux sur leurs propriétés élastiques ainsi que les méthodes de synthèse ont également été présentées.

Dans le dernier chapitre, nous résumons rigoureusement nos contributions dans le domaine et nous listons le contenu détaillé. Nous étalons quelques propriétés élastiques et les effets de la température et de la vitesse de déformation sur l'élasticité linéaire des matériaux 2D hybrides des groupes III, IV-IV et III-VI. Dans le souci de comprendre les comportements élastiques de nos matériaux hexagonaux lorsqu'ils sont soumis à différents défauts tels que les fissures et les nanopores, nous examinons l'effet de ces défauts et les moyens d'en tirer parti pour améliorer la contrainte de rupture des matériaux.

Finalement, les résultats essentiels de nos travaux seront donnés dans la conclusion

Liste des contributions et communications

Durant ces années de thèse, notre recherche dans le domaine a abouti à cinq contributions majeurs dans la simulation des propriétés physiques des matériaux à deux dimensions. Parmi ces cinq travaux, nous avons publié trois dans des journaux internationaux et les deux autres sont soumis et en phase de révision. Par ailleurs, nous avons également contribué à des activités scientifiques nationales et internationale à travers des communications orales et des posters. La liste des travaux est la suivante :

Publications

1. Thermal strain engineering of mechanical properties in Si-based hybrid sheets via molecular dynamics simulations [Journal of Molecular Modeling 27.10 (2021) : 1-11].
2. Mechanical response of η -layered borophene : impact of strain, temperature, vacancies and intercalation [The European Physical Journal Applied Physics 90.3 (2020) : 30401] .
3. Thermo-mechanical response of pristine and defective 2D hexagonal boron oxide [Materials Science & Engineering B 283 (2022) : 115758].

4. Modulate the fracture strength of InTe nanosheet by pores/auxiliary cracks : A molecular dynamics study [Materials Science & Engineering B (soumis)].
5. Structure-mechanical property relations of nanoporous two-dimensional indium selenide : A molecular dynamics study [Journal of Molecular Modeling (soumis)]

Communications

- Poster sur, "Hydrogenation and Defect Formation Effect on Mechanical Properties of 2D MoS_2 " présenté lors d'International Workshop on Advanced applications of Emergent materials, du 04 au 07 Décembre 2019 à la Faculté des Sciences-Université Mohammed V, Rabat, Maroc.
- "Molecular dynamics simulations on tensile behaviors of layered borophene : effect of strain and defects vacancy", aux Journées Nationales des doctorants et des jeunes chercheurs, le 15,16 et 27 Juillet 2021 à la Faculté des Sciences-Université Mohammed V, Rabat, Maroc.
- "Thermal strain engineering mechanical properties in Si-based hybrid sheets : molecular dynamics simulations", à US-North Africa Conference of Nanotechnology convergence on Energy, Environment and Health, du 4 au 8 Avril 2022, a tenue virtuellement.
- "Thermomechanical properties of Si-based hybrid sheets by molecular dynamics simulations" aux Journées Doctoriales, du 18 au 22 Juillet 2022 à la Faculté des Sciences-Université Mohammed V, Rabat, Maroc.

Chapitre I

Propriétés élastiques des matériaux

En général, lorsqu'une force extérieure est appliquée à un objet, elle peut l'étirer, le comprimer, le tordre ou le briser et s'accompagner d'un changement de forme ou de taille. Par conséquent, la restauration du matériau à sa forme et à sa taille d'origine après l'élimination des forces de déformation est appelée élasticité. Les caractéristiques des déformations élastiques constituent l'intérêt de notre travail et sont quantifiées par le module élastique tel que le module de Young, le module de cisaillement ou le module de compressibilité, qui mesurent la quantité de contrainte nécessaire pour atteindre une unité de déformation. De plus l'étude des caractéristiques des déformations élastiques et plastiques des matériaux contenant des défauts structuraux était cruciale pour clarifier la contrainte autour du défaut.

Ce chapitre regroupe les caractéristiques des déformations élastiques et plastiques d'un matériau pur et defectueux utilisée au cours de cette thèse. Pour commencer, nous présenterons les paramètres élastiques qui dépendent d'une direction tels que : le module de Young, le coefficient de Poisson, le module de cisaillement et le module de compressibilité. Puis nous présenterons la loi de Hooke qui modélise les coefficients élastiques en notation tensorielle et en notation de Voigt sous conditions de symétrie. Dans la troisième partie, nous aborderons la problématique de la fissuration des corps soumis à un champ de contraintes ainsi que les concepts de base et certains outils permettant de calculer le facteur d'intensité de contrainte.

1 Modules élastiques

Il est connu que la description systématique des propriétés mécaniques des matériaux tient compte de leur isotropie et de leur homogénéité. Un matériau isotrope est un matériau dont les propriétés demeurent les mêmes lorsqu'il est testé dans différentes directions, contrairement à un matériau anisotrope dont les propriétés varient en fonction de la direction. De plus, la définition de l'homogénéité dépend fortement du contexte utilisé. Un matériau est dit homogène lorsque toutes ses propriétés ont la même valeur

partout dans le matériau considéré. Sinon, on parle d'un matériau hétérogène [61]. La spécification de la manière dont la contrainte et la déformation doivent être mesurées, y compris les directions, permet de définir de nombreux types de modules élastiques, qui sont présentés ci-dessous :

1.1 Module de Young et coefficient de Poisson

Le module de Young (E ou Y) est une mesure de la rigidité d'un solide ou de sa résistance à la déformation élastique sous charge [62]. Il décrit la relation entre la contrainte σ (force par unité de surface) et la déformation ε (déformation proportionnelle dans un objet) le long d'un axe ou d'une ligne comme le montre la figure. I.1.

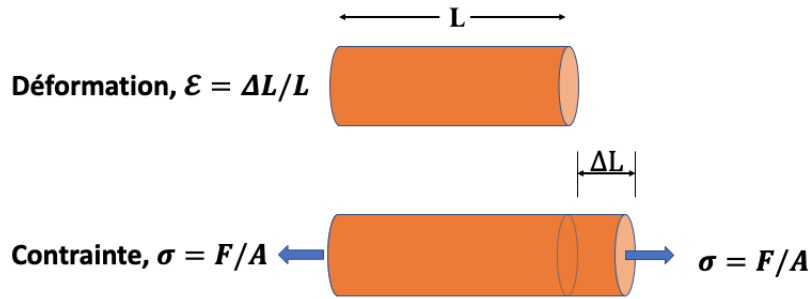


FIGURE I.1 – Illustration de l'application d'une contrainte σ et d'une déformation ε à un matériau élastique.

Dans le cas d'un matériau homogène et isotrope, le module de Young E est exprimé comme suit :

$$E = \frac{\text{Contrainte normale}}{\text{Déformation longitudinale}} = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{F/A}{\Delta L/L} = \frac{FL}{A\Delta L}. \quad (\text{I.1})$$

où σ est la contrainte uniaxiale, est également la force (F , de compression ou d'extension) appliquée à la surface de la section transversale (A). Par ailleurs, la déformation ε , qui correspond aussi le changement de longueur ΔL (négatif en cas de compression ; positif en cas d'étirement) par rapport à la longueur initiale L .

Le module de Young, généralement exprimé en Pascal (Pa), peut être utilisé pour prédire l'allongement ou la compression d'un objet tant que la contrainte est inférieure à la limite d'élasticité du matériau.

Le coefficient de Poisson est le rapport entre la déformation de contraction transversale et la déformation d'extension longitudinale dans la direction de la force d'étirement. La déformation en traction est considérée comme positive et la déformation en compression est considérée comme négative. La définition du coefficient de Poisson contient un signe moins, de sorte que les matériaux conventionnels ont un coefficient positif. Il

est généralement représenté par un symbole grec, ν sans dimension, est donnée par [63, 64] :

$$\nu = -\frac{\varepsilon_{\text{trans}}}{\varepsilon_{\text{axial}}} = -\frac{\text{déformation latérale}}{\text{déformation longitudinale}} = -\frac{\varepsilon_y}{\varepsilon_x} = -\frac{\varepsilon_z}{\varepsilon_x}. \quad (\text{I.2})$$

où $\varepsilon_{\text{trans}}$ est la déformation transversale (négative pour la tension axiale (étirement), positive pour la compression axiale) et $\varepsilon_{\text{axial}}$ est la déformation axiale (positive pour la tension axiale, négative pour la compression axiale) (cf. Figure. I.2 pour plus de détails).

De plus, il existe une autre catégorie de matériaux dits auxétiques qui ont un coefficient de Poisson négatif contrairement aux matériaux conventionnels. Si ces matériaux auxétiques sont étirés dans une direction, ils présentent une augmentation de volume due au fait que la longueur dans l'autre direction latérale augmente aussi comme illustré dans la figure. I.3. Le coefficient de Poisson dans ce type de matériau dépend du degré d'anisotropie et des directions du matériau. La théorie de l'élasticité linéaire isotrope permet des coefficients de Poisson compris entre -1 et 0.5 pour un objet à surfaces libres sans contrainte.

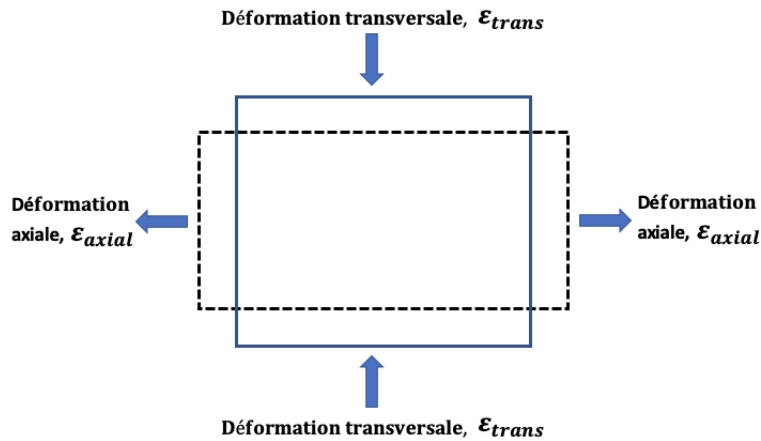


FIGURE I.2 – Déformation transversale $\varepsilon_{\text{trans}}$ et axiale $\varepsilon_{\text{axiale}}$ d'un matériau conventionnel

1.2 Modules de cisaillement et d'élasticité isostatique

Le module de cisaillement est également connu sous le nom de module de rigidité. Il est normalement désigné par G . Il s'agit du rapport entre la contrainte de cisaillement et le déplacement par unité de longueur de l'objet (déformation de cisaillement) dans la limite élastique. En effet, une force de cisaillement excessive entraîne la déformation permanente et la rotation ou la rupture du matériau.

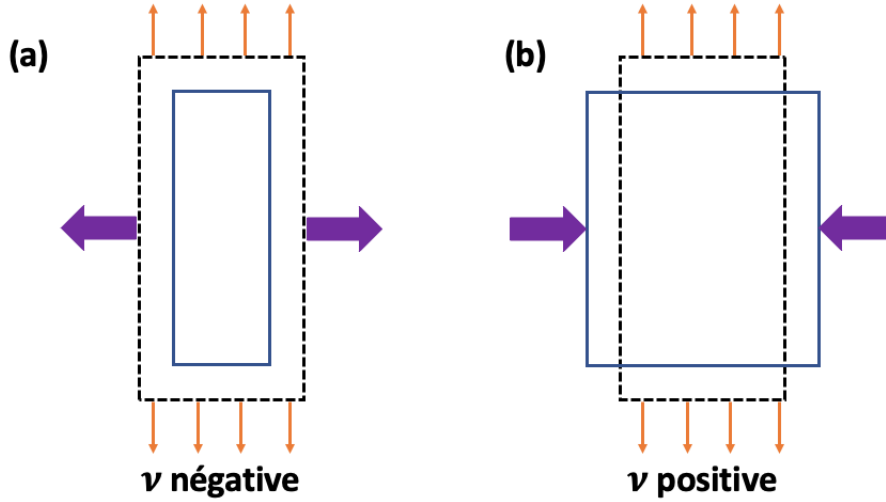


FIGURE I.3 – Représentation schématique (a) matériau auxétique (b) matériau conventionnel

L'équation de la contrainte de cisaillement est la suivante :

$$\tau = \frac{\text{Force de cisaillement}}{\text{Surface sous cisaillement}} = \frac{F}{A}. \quad (\text{I.3})$$

La déformation de cisaillement Φ est mesurée comme un changement d'angle entre des lignes qui étaient à l'origine perpendiculaires comme montré dans la figure. I.4.

$$\Phi = \tan(\theta) = \theta = \frac{x}{h}. \quad (\text{I.4})$$

Ainsi, le module de cisaillement G s'exprime comme suit [65, 66] :

$$G = \frac{\text{Contrainte de cisaillement}}{\text{Déformation de cisaillement}} = \frac{\tau}{\Phi} = \frac{F/A}{\theta} = \frac{F}{A\theta} = \frac{Fh}{Ax}. \quad (\text{I.5})$$

La valeur du module de cisaillement est toujours un nombre positif. Une grande valeur du module de cisaillement indique qu'un solide est très rigide. En d'autres termes, une force importante est nécessaire pour produire une déformation. Alors qu'une petite valeur du module de cisaillement indique que le solide est doux ou flexible. Une petite force est nécessaire pour le déformer.

Pour les matériaux isotropes, le module de cisaillement G s'exprime en termes du module de Young E et du coefficient de Poisson ν par la relation suivante [63, 64] :

$$G = \frac{E}{2(1 + \nu)}. \quad (\text{I.6})$$

le module d'élasticité isostatique B est une mesure de la capacité d'une substance à résister aux changements de volume lorsqu'elle est soumise à une compression de

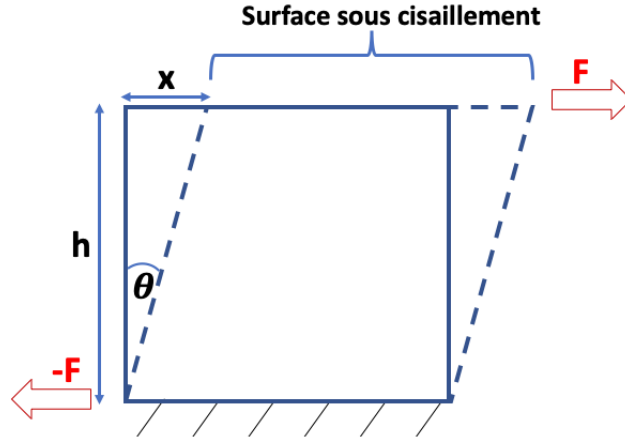


FIGURE I.4 – Représentation d'un objet soumis à une contrainte de cisaillement

tous les côtés (cf. Figure. I.5). Il est égal au quotient de la pression appliquée par la déformation relative. Il est exprimé comme suit :

$$B = -V_s \frac{dP}{dV_s}. \quad (\text{I.7})$$

où P est la pression, V_s est le volume initial de la substance, et dP/dV_s désigne la dérivée de la pression par rapport au volume.

Le module d'élasticité isostatique permet d'exprimer la relation de proportionnalité entre le premier invariant du tenseur des contraintes et le premier invariant du tenseur des déformations par la formule suivante :

$$s = B.e \quad (\text{I.8})$$

où $s = \sum_i \frac{1}{3} \sigma_{ii}$ est la contrainte isostatique (en unité de pression), et la déformation isostatique (sans dimension) est donnée par $e = \sum_i \varepsilon_{ii} = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}$.

L'inverse du module d'élasticité isostatique est la compressibilité ($K = \frac{1}{B}$), de sorte qu'une substance difficile à comprimer a un module d'élasticité isostatique élevé mais une faible compressibilité et qu'une substance facile à comprimer a une compressibilité élevée mais un faible module d'élasticité.

En bref, le module de Young E , le module de cisaillement G , le coefficient de Poisson ν et le module d'élasticité isostatique B sont des modules d'élasticité, tous basés sur la loi de Hooke et reliés entre eux par les équations suivantes [64] :

$$B = \frac{EG}{3(3G - E)}. \quad (\text{I.9})$$

$$B = \frac{1}{3} \frac{E}{(1 - 2\nu)}. \quad (\text{I.10})$$

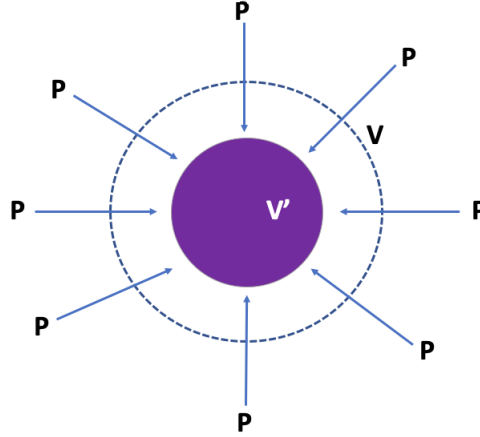


FIGURE I.5 – Illustration de la compression uniforme

1.3 Diagramme contrainte-déformation

La courbe contrainte-déformation d'un matériau, quelle que soit la forme de sa déformation, peut être considérée comme la relation entre la contrainte et la déformation. Elle est obtenue en appliquant progressivement une charge sur le matériau choisi et en mesurant la déformation. Par conséquent, la déformation du matériau peut présenter trois zones différentes comme illustré dans la figure. I.6.

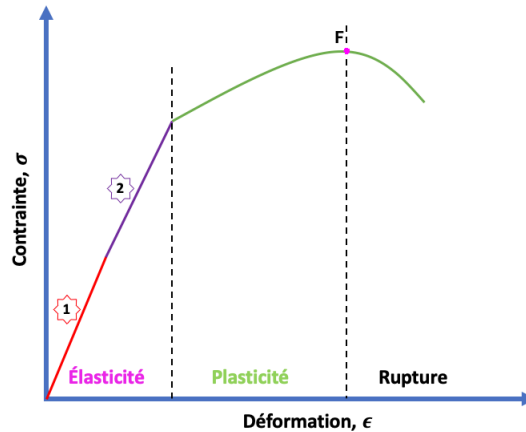


FIGURE I.6 – Courbe contrainte-déformation. Domaine élastique et domaine plastique

La première zone identifie la région élastique, qui est constituée de deux phases :

- (1) C'est la région de la courbe contrainte-déformation qui obéit à la loi de Hooke.

Dans cette limite, le rapport entre la contrainte et la déformation nous donne une constante de proportionnalité connue sous le nom de module de Young. Cette partie du graphique est appelée déformation élastique linéaire. La deuxième phase (2) présente une déformation élastique non linéaire. Dans la région élastique, le matériau revient à sa position initiale lorsque la charge qui agit sur lui est complètement supprimée. Au-delà de cette limite, le matériau ne revient pas à sa position initiale et une déformation plastique commence à apparaître. Le point (F) du graphique définit la limite de la région plastique appelée point de contrainte ultime qui représente la contrainte maximale qu'un matériau peut supporter avant de se rompre. Au-delà de ce point, la rupture se produit.

Il est possible de distinguer certaines caractéristiques communes parmi les courbes contrainte-déformation de divers groupes de matériaux, et sur cette base, les matériaux se répartissent en deux grandes catégories, à savoir les matériaux ductiles et les matériaux fragiles.

Matériaux ductiles se rompent progressivement et peuvent subir une déformation plastique importante avant la rupture. Leur pourcentage d'allongement avant rupture sous une charge de traction est plus élevé.

Matériaux fragiles se brisent par une rupture soudaine et présentent une déformation plastique négligeable. Le pourcentage d'allongement des matériaux fragiles avant rupture sous une charge de traction est très faible. Par conséquent, ils ne peuvent pas être étirés comme les substances ductiles.

2 Loi de Hooke

2.1 Généralités

Les contraintes et les déformations du matériau à l'intérieur d'un matériau élastique continu sont reliées par une relation linéaire qui est souvent appelée loi de Hooke

$$\sigma = E \cdot \varepsilon \quad (\text{I.11})$$

où E n'est autre que le module de Young. Cependant, l'état de déformation d'un milieu solide autour d'un point donné ne peut être décrit par un vecteur unique. La loi de Hooke pour les milieux continus sous forme matricielle est alors [67] :

$$\sigma_{ij} = \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 C_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \text{ avec } i, j = 1, 2, 3, \quad (\text{I.12})$$

où C est un tenseur d'ordre 4 (c'est-à-dire une application linéaire entre des tenseurs d'ordre 2) généralement appelé tenseur des rigidités ou tenseur d'élasticité. On peut

également l'écrire sous la forme d'inverse, qui sont définies par la relation entre le tenseur des déformations et le tenseur des contraintes :

$$\varepsilon_{ij} = \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 S_{ijkl} \sigma_{kl}, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (\text{I.13})$$

où S est le tenseur des souplesses ou le tenseur des complaisances élastiques.

Le tenseur $[C]$ d'ordre 4 et de dimension 3 est représenté par une matrice de $3 \times 3 \times 3 \times 3 = 81$ nombres réels c_{ijkl} , de telle sorte que les equations (I.12) et (I.13) prennent les deux formes suivantes :

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{32} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{21} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1123} & C_{1132} & C_{1113} & C_{1131} & C_{1112} & C_{1121} \\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & C_{2223} & C_{2232} & C_{2213} & C_{2231} & C_{2212} & C_{2221} \\ C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & C_{3323} & C_{3332} & C_{3313} & C_{3331} & C_{3312} & C_{3321} \\ C_{2311} & C_{2322} & C_{2333} & C_{2323} & C_{2332} & C_{2313} & C_{2331} & C_{2312} & C_{2321} \\ C_{3211} & C_{3222} & C_{3233} & C_{3223} & C_{3232} & C_{3213} & C_{3231} & C_{3212} & C_{3221} \\ C_{1311} & C_{1322} & C_{1333} & C_{1323} & C_{1332} & C_{1313} & C_{1331} & C_{1312} & C_{1321} \\ C_{3111} & C_{3122} & C_{3133} & C_{3123} & C_{3132} & C_{3113} & C_{3131} & C_{3112} & C_{3121} \\ C_{1211} & C_{1222} & C_{1233} & C_{1223} & C_{1232} & C_{1213} & C_{1231} & C_{1212} & C_{1221} \\ C_{2111} & C_{2122} & C_{2133} & C_{2123} & C_{2132} & C_{2113} & C_{2131} & C_{2112} & C_{2121} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{32} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{31} \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{21} \end{bmatrix} \quad (\text{I.14})$$

et

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{32} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{31} \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{21} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{1111} & S_{1122} & S_{1133} & S_{1123} & S_{1132} & S_{1113} & S_{1131} & S_{1112} & S_{1121} \\ S_{2211} & S_{2222} & S_{2233} & S_{2223} & S_{2232} & S_{2213} & S_{2231} & S_{2212} & S_{2221} \\ S_{3311} & S_{3322} & S_{3333} & S_{3323} & S_{3332} & S_{3313} & S_{3331} & S_{3312} & S_{3321} \\ S_{2311} & S_{2322} & S_{2333} & S_{2323} & S_{2332} & S_{2313} & S_{2331} & S_{2312} & S_{2321} \\ S_{3211} & S_{3222} & S_{3233} & S_{3223} & S_{3232} & S_{3213} & S_{3231} & S_{3212} & S_{3221} \\ S_{1311} & S_{1322} & S_{1333} & S_{1323} & S_{1332} & S_{1313} & S_{1331} & S_{1312} & S_{1321} \\ S_{3111} & S_{3122} & S_{3133} & S_{3123} & S_{3132} & S_{3113} & S_{3131} & S_{3112} & S_{3121} \\ S_{1211} & S_{1222} & S_{1233} & S_{1223} & S_{1232} & S_{1213} & S_{1231} & S_{1212} & S_{1221} \\ S_{2111} & S_{2122} & S_{2133} & S_{2123} & S_{2132} & S_{2113} & S_{2131} & S_{2112} & S_{2121} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{32} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \\ \sigma_{21} \end{bmatrix} \quad (\text{I.15})$$

2.2 Symétries des souplesses et rigidités

Le respect des symétries matérielles du tenseur de déformation et du tenseur de contrainte impose les symétries suivantes :

$$C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk}. \quad (\text{I.16})$$

Cela réduit le nombre de constantes élastiques (C_{ijkl}) de 81 à 36. Les représentations (I.14) et (I.15) deviennent :

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1123} & C_{1113} & C_{1112} \\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & C_{2223} & C_{2213} & C_{2212} \\ C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & C_{3323} & C_{3313} & C_{3312} \\ C_{2311} & C_{2322} & C_{2333} & C_{2323} & C_{2313} & C_{2312} \\ C_{1311} & C_{1322} & C_{1333} & C_{1323} & C_{1313} & C_{1312} \\ C_{1211} & C_{1222} & C_{1233} & C_{1223} & C_{1213} & C_{1212} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{12} \end{bmatrix} \quad (\text{I.17})$$

et

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{1111} & S_{1122} & S_{1133} & S_{1123} & S_{1113} & S_{1112} \\ S_{2211} & S_{2222} & S_{2233} & S_{2223} & S_{2213} & S_{2212} \\ S_{3311} & S_{3322} & S_{3333} & S_{3323} & S_{3313} & S_{3312} \\ S_{2311} & S_{2322} & S_{2333} & S_{2323} & S_{2313} & S_{2312} \\ S_{1311} & S_{1322} & S_{1333} & S_{1323} & S_{1313} & S_{1312} \\ S_{1211} & S_{1222} & S_{1233} & S_{1223} & S_{1213} & S_{1212} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} \quad (\text{I.18})$$

D'une manière simplifiée. On adopte la notation matricielle à deux indices de notation de 1 à 6, appelée notation de Voigt, sous la forme suivante :

$$\text{les indices } (1,1) \rightarrow 1, (2,2) \rightarrow 2, (3,3) \rightarrow 3, (2,3) \rightarrow 4, (1,3) \rightarrow 5, (1,2) \rightarrow 6 \quad (\text{I.19})$$

par conséquent les deux tenseurs de déformation et de contrainte (I.14) et (I.15) deviennent à six composantes , en notation de Voigt :

$$[\sigma] = \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} ; [\varepsilon] = \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{13} \\ 2\varepsilon_{12} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \quad (\text{I.20})$$

Notons qu'il est nécessaire d'intégrer des facteurs multiplicatifs afin de garder une représentation cohérente des propriétés physiques.

D'une manière explicite, nous avons :

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \quad (\text{I.21})$$

et

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & S_{15} & S_{16} \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} & S_{25} & S_{26} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} & S_{35} & S_{36} \\ S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} & S_{45} & S_{46} \\ S_{51} & S_{52} & S_{53} & S_{54} & S_{55} & S_{56} \\ S_{61} & S_{62} & S_{63} & S_{64} & S_{65} & S_{66} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} \quad (\text{I.22})$$

où les indices 1 à 3 correspondent à la compression ou à la traction, tandis que les indices 4 à 6 concernent le cisaillement. Le nombre de coefficients élastiques indépendants est lié à la symétrie du matériau

2.3 Effets de la symétrie du matériau

Chaque matériau ayant une forme géométrique subit la loi de symétrie et les coefficients élastiques indépendantes de matrice $[C]$ dépend du degré de symétrie de matériau (fort ou faible). En gardant à l'esprit que lorsque l'on tient compte d'une symétrie, la forme de la matrice $[C]$ de rigidité est identique à celle de la matrice des souplesses $[S]$.

Le matériau avec 21 constantes élastiques indépendantes est appelé anisotrope, sa matrice de rigidité est donnée comme suit [63] :

$$[C] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ & & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ & & & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ \text{Symétrique} & & & & C_{55} & C_{56} \\ & & & & & C_{66} \end{bmatrix} \quad (\text{I.23})$$

Une réduction supplémentaire du nombre de constantes élastiques indépendantes peut être obtenue par l'utilisation de plans de symétrie du matériau.

Pour les matériaux monocliniques, le nombre de constantes indépendantes est de 13. La matrice de rigidité est donnée par :

$$[C] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & C_{16} \\ & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & C_{26} \\ & & C_{33} & 0 & 0 & C_{36} \\ & \text{Symétrique} & & C_{44} & C_{45} & 0 \\ & & & & C_{55} & 0 \\ & & & & & C_{66} \end{bmatrix} \quad (\text{I.24})$$

Les constantes élastiques indépendantes ont encore diminué jusqu'à atteindre 9 pour le matériau orthotrope. La matrice de rigidité est donnée comme suit :

$$[C] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & \text{Symétrique} & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{55} & 0 \\ & & & & & C_{66} \end{bmatrix} \quad (\text{I.25})$$

9, 6 et 3 ce sont les coefficients élastiques indépendants des systèmes cristallins trigonal, hexagonal et cubique, respectivement, qui sont présentés comme suit [67, 68] :

$$[C] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & -C_{15} & 0 \\ & C_{11} & C_{13} & -C_{14} & C_{25} & 0 \\ & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & \text{Symétrique} & & C_{44} & 0 & C_{25} \\ & & & & C_{44} & -C_{44} \\ & & & & & C_{66} \end{bmatrix} \quad (\text{I.26})$$

$$[C] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & \text{Symétrique} & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{44} & 0 \\ & & & & & C_{66} \end{bmatrix} \quad (\text{I.27})$$

avec $C_{66} = \frac{C_{11} - C_{12}}{2}$

$$[C] = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ & \text{Symétrique} & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{44} & 0 \\ & & & & & C_{44} \end{bmatrix} \quad (\text{I.28})$$

Nous concluons que plus la symétrie des matériaux est forte (réseau cubique,..), moins les coefficients élastiques indépendantes, ce qui facilite le calcul.

3 Mécanique de la rupture

Dans le domaine de la mécanique de la rupture, le critère de rupture qui peut être utilisé pour estimer la résistance à la rupture d'une structure, est un aspect important de la conception structurelle. À l'échelle microscopique, les matériaux contiennent des défauts et des imperfections au sein de la structure cristalline, et d'autres défauts résultant des processus de fabrication et de manipulation. L'existence de défauts tels que les fissures entraîne une redistribution des contraintes et une concentration des contraintes autour des parties discontinues des matériaux [69, 70]. En conséquence, des approches de mécanique de la rupture prenant en compte l'existence de défauts ont été utilisées pour fournir une analyse rationnelle permettant de mesurer la réduction de la résistance.

3.1 Contraintes Vs fissures

La figure. 1.7 montre une plaque infiniment grande en matériau élastique linéaire avec un défaut elliptique. La plaque est soumise à une tension uniforme, σ_0 . La distribution des contraintes autour du défaut a été résolue par Inglis en 1913 [71] et est donnée comme suit :

$$\sigma_{yy} = \sigma_0 \left(1 + 2\frac{a}{c} \right) = \sigma_0 \left(1 + 2\sqrt{\frac{a}{\rho}} \right). \quad (\text{I.29})$$

dans laquelle a et c sont respectivement le grand et le petit axe de l'ellipse et ρ est le rayon de courbure à la pointe de la fissure. σ_{yy} est la contrainte de traction autour du défaut (le long de la direction y), et σ_0 n'est autre que la force motrice de fissure ou champ de contrainte loin du défaut.

D'après l'équation 1.29, on peut voir que σ_{yy} dépend de a (la demi-longueur de défaut) et du rayon de courbure (ρ) au point d'intérêt. Notez que pour un défaut circulaire avec $a = \rho$, (c'est à dire $a = c = \rho$), la contrainte de traction (σ_{yy}) autour du défaut est égale à $3\sigma_0$. Cela indique que le défaut réduira la résistance d'un matériau de trois fois si un critère de résistance est utilisé. Pour une fissure pointue, où $\rho = 0$, une contrainte infinie aux extrémités de la fissure est attendue. Ce résultat suggère qu'un matériau présentant une fissure ne peut supporter aucune charge appliquée si l'on se base sur le critère de résistance. En réalité, il a été observé qu'un matériau présentant des défauts (ou des fissures) a toujours la capacité de résister à une certaine quantité de charge appliquée. Cela indique que les critères de contrainte ordinaires ne sont pas appropriés à ce cas et que les concepts de mécanique de la rupture, qui seront abordés ci-dessous, doivent être appliqués.

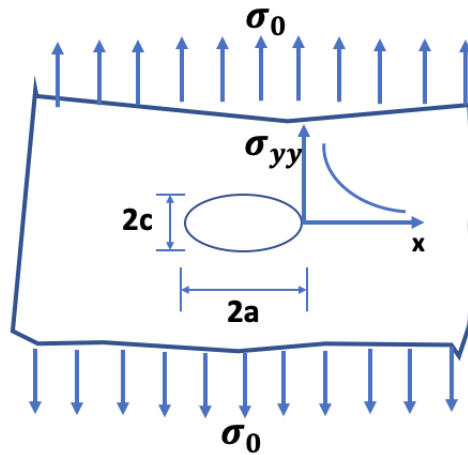


FIGURE I.7 – La distribution des contraintes autour d'un trou elliptique dans une plaque infiniment grande soumise à une tension uniforme σ_0

3.2 Mécanique linéaire élastique de la rupture (MLER)

3.2.1 Critère de l'énergie

La première des approches de la mécanique de la rupture a été proposée par Griffith en 1921 [72]. Il a proposé qu'un corps fragile se brise en raison de la présence de nombreuses fissures ou défauts internes qui produisent une concentration locale de contraintes. Il a déclaré que le corps élastique sous contrainte doit passer d'un état non endommagé à un état endommagé par un processus au cours duquel une diminution de l'énergie potentielle a lieu. Il a également déclaré que l'instabilité de la fracture est atteinte lorsque l'augmentation de l'énergie de surface, qui est causée par l'extension de la fissure, est équilibrée par la libération de l'énergie de déformation élastique dans

le volume entourant la fissure. La figure. I.8 montre une plaque infiniment grande dont la longueur initiale de la fissure est de $2a$ et qui est soumise à une tension uniforme σ_0 . D'après l'hypothèse d'une énergie de surface constante, le critère d'énergie de Griffith pour la propagation de la fissure peut être représenté mathématiquement comme suit :

$$\delta U = \delta U_{SE}. \quad (\text{I.30})$$

dans laquelle δU est la diminution de l'énergie potentielle due à l'augmentation de la surface de la fissure et δU_{SE} est l'augmentation de l'énergie de surface due à l'augmentation de la surface de la fissure.

L'expression de la contrainte critique σ_c à laquelle une fissure se propagera sur la base du critère d'énergie de Griffith peut être écrite comme :

$$\sigma_0 = \sigma_c, \text{ (force motrice de la fissure = résistance à la rupture)} \quad (\text{I.31})$$

et

$$\sigma_c = \sqrt{\frac{2\gamma E}{\pi a}}. \quad (\text{I.32})$$

où 2γ correspond à l'énergie nécessaire pour créer une surface unité de fissuration. Il s'agit en fait d'une énergie critique que l'on note G_{1c} en $J.m^{-2}$ et E est le module de Young.

On peut donc réécrire I.32 comme suit :

$$\sigma_c = \sqrt{\frac{G_{1c} E}{\pi a}}. \quad (\text{I.33})$$

Il convient de noter que le critère d'énergie de Griffith est basé sur l'hypothèse qu'il n'y a pas (ou négligeable) de déformation plastique dans le matériau. Cependant, pour la plupart des matériaux, une déformation plastique a toujours lieu.

Ainsi, le critère de Griffith doit être modifié pour les matériaux présentant une déformation plastique importante. Orowan [73, 74] et Irwin [75–77] sont arrivés à la conclusion que même un léger écoulement plastique qui se produit dans le cas d'une rupture fragile absorbera une grande quantité d'énergie supplémentaire nécessaire pour créer de nouvelles surfaces.

Le critère d'Irwin pour la propagation des fissures peut être exprimé comme suit :

$$\delta U \geq \delta U_{SE} + \delta U_{PL}. \quad (\text{I.34})$$

où δU_{PL} est l'énergie plastique dissipée en raison de l'augmentation de la surface de la fissure.

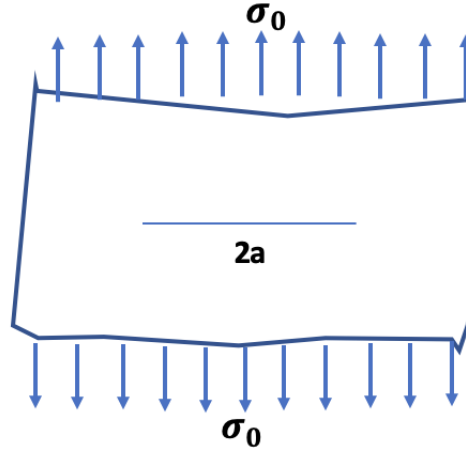


FIGURE I.8 – Une plaque infiniment grande avec une fissure de longueur $2a$ soumise à une tension uniforme normale au plan de la fissure.

De même, la contrainte critique σ_c à laquelle une fissure se propagera peut être exprimée comme suit :

$$\sigma_c = \sqrt{\frac{(2\gamma + \gamma_P)E}{\pi a}}. \quad (\text{I.35})$$

où γ_P est l'énergie plastique par unité d'extension de fissure par fond de fissure.

Irwin a reconnu que l'énergie plastique dissipée dans le matériau est beaucoup plus élevée que l'énergie de surface dissipée. Il a donc proposé que l'énergie de surface puisse être négligée par rapport à l'énergie plastique.

3.2.2 Critère du facteur d'intensité de contrainte

Contrairement à un trou macroscopique dans une plaque semi-infinie, le rayon de la pointe d'une fissure est infiniment petit. Cette particularité géométrique du défaut rend inadéquate l'utilisation du facteur de concentration de contrainte k_t pour l'analyse des contraintes près du fond de la fissure. En effet, il existe une singularité de contrainte, $\sigma \rightarrow \infty$, à la pointe d'une fissure. la Figure. I.9 présente la distribution de la composante de contrainte σ_{yy} près du fond de fissure. r et θ sont les coordonnées cylindriques relatives à la pointe de la fissure.

La distribution des contraintes σ_{ij} près du fond de fissure comme le montre la figure. I.9, peut être exprimée par l'équation suivante [76] :

$$\sigma_{ij} = \frac{K_1}{\sqrt{2\pi r}} f(\theta_{ij}) + \text{termes d'ordre supérieur} \quad (\text{I.36})$$

où σ_{ij} représente les composantes de la matrice des contraintes, K_1 est le facteur d'intensité de contrainte en mode I, et $f(\theta_{ij})$ est une quantité sans dimension qui varie

avec la charge et la géométrie. En général, K_1 dépend de la charge appliquée, de la longueur de la fissure et de la forme de l'échantillon.

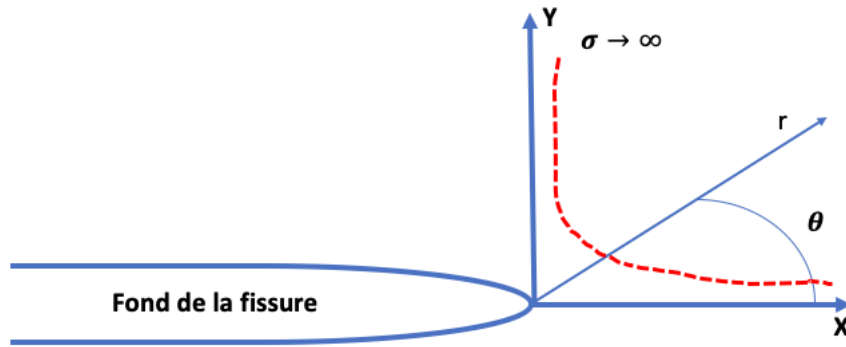


FIGURE I.9 – Répartition des contraintes devant un fond de fissure selon la théorie de l'élasticité.

La sollicitation d'une fissure s'effectue en trois modes distincts :

- Mode I - représente la sollicitation en tension (Ouverture selon la normale au plan de la fissure),
- Mode II - représente la sollicitation en cisaillement (Ouverture parallèlement au plan de la fissure et perpendiculaire au front de fissure), et
- Mode III - représente la sollicitation par déchirement (Ouverture parallèlement au plan de la fissure et parallèlement au front de fissure).

la Figure. I.10 présente une représentation de ces modes. Dans la majorité des cas, les fissures de fatigue sont sollicitées en Mode I.

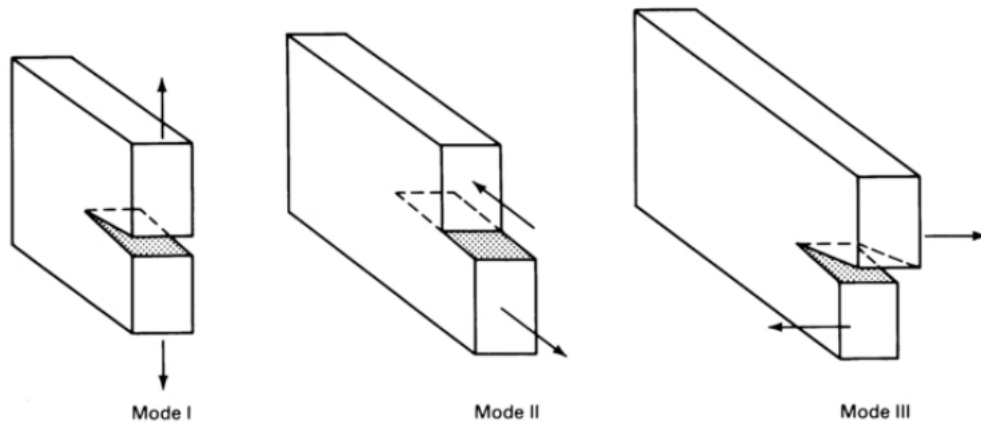


FIGURE I.10 – Les différents modes de sollicitation [78].

Le calcul d'intensité de contrainte en Mode 1 (K_1) est généralement exprimé sous la forme suivante [79]

$$K_1 = \sigma \sqrt{\pi a} F\left(\frac{a}{b}\right) \text{ en } MPa\sqrt{m} \quad (\text{I.37})$$

dans laquelle σ est contraintes dans le matériau normales au plan de fissure et en l'absence de celle-ci, a est la longueur d'une fissure de bord ou la moitié de la longueur d'une fissure intérieure, et $F(a/b)$ est un facteur de correction de la géométrie qui dépend du type de charge, de la longueur de la fissure et de la forme de l'éprouvette.

Selon Irwin [76], la relation suivante peut être dérivée entre le facteur d'intensité de contrainte du mode I (K_I) et le taux de restitution d'énergie G :

$$K_I = \sqrt{EG} \quad (\text{I.38})$$

$$K_I = \sqrt{\frac{EG}{1 - \nu^2}} \quad (\text{I.39})$$

Au niveau de chargement produisant la propagation brutale d'une fissure, c'est-à-dire entraînant la ruine de la pièce dans laquelle se trouve cette fissure, correspond une valeur particulière de K_I . Cette valeur particulière de K_I est désignée par le symbole K_{Ic} et c'est une propriété du matériau au même titre que la limite d'élasticité. K_{Ic} caractérise la résistance du matériau à la propagation brutale de fissures.

Les deux critères K_{Ic} et G_{Ic} caractérisent la propagation brutale d'une fissure. Ces deux critères sont liés par les relations suivantes :

On peut donc réécrire I.38 et I.39 comme suit :

Pour un état de déformations planes, cas des structures épaisses ;

$$K_{Ic} = \sqrt{EG_{Ic}} \quad (\text{I.40})$$

Pour un état de contraintes planes, cas des structures minces ;

$$K_{Ic} = \sqrt{\frac{EG_{Ic}}{1 - \nu^2}} \quad (\text{I.41})$$

où ν est le coefficient de Poisson

3.3 Mécanique élasto-plastique de la rupture

3.3.1 Modèle de Dugdale

Sans modification, la mécanique linéaire élastique de la rupture (MLER) ne peut être utilisée pour décrire le comportement d'un matériau réel si la zone du processus de rupture n'est pas négligeable par rapport à la taille (ou à la fissure) de la structure. Pour un matériau réel, il y a toujours une zone de processus de fracture de longueur finie devant une fissure. Pour simuler la zone de processus observée dans une plaque métallique mince, Dugdale [80] a proposé un modèle qui suppose que la longueur de la zone plastique est beaucoup plus grande que l'épaisseur de la feuille et suppose

que la zone plastique est une bande élastique devant la pointe de la fissure. Dugdale a également postulé que l'effet de la déformation est d'augmenter la longueur de la fissure par l'étendue de la zone plastique, comme le montre la figure. I.11 pour une fissure de longueur finie dans un milieu infini soumis à une contrainte à distance uniforme, σ_0 . À l'intérieur de la bande, $a \leq |X| \leq c$, l'ouverture des faces de la fissure est limitée par la pression de fermeture, σ_y . La longueur d de cette bande peut être déterminée à partir de la condition que le champ de contrainte soit non singulier.

En utilisant la superposition des solutions pour la feuille non fissurée chargée par une tension à distance σ_0 et pour la feuille fissurée avec une charge à distance et avec une pression, $P_2(X) = \sigma_0$ pour $|X| \leq a$ et $P_2(X) = \sigma_0 - \sigma_y$ pour $a \leq |X| \leq c$, Dugdale a obtenu une expression pour la longueur de la zone plastique :

$$d = 2a \sin^2\left(\frac{\pi\sigma_0}{4\sigma_y}\right) \cong \frac{\pi}{8} \left(\frac{K_1}{\sigma_y}\right)^2 \quad (\text{I.42})$$

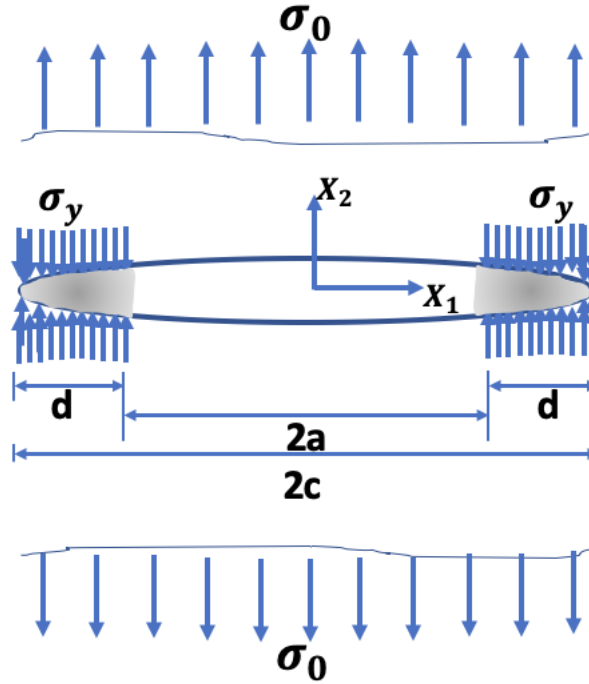


FIGURE I.11 – Schéma du modèle Dugdale. La zone plastique est modélisée par une bande soumise à une contrainte normale constante σ_y . La longueur de la fissure est de $2a$ et la taille de la zone plastique devant le fond de fissure est d

3.3.2 Modèle de Barenblatt

Semblable au modèle de Dugdale, Barenblatt [81] proposé qu'une force cohésive agit sur une zone de plastique en avant de la pointe réelle de fissure. Cependant,

la force cohésive dans le modèle de Barenblatt provient de la cohésion moléculaire, contrairement au modèle de Dugdale.

Dans ce modèle, Barenblatt a proposé que les contraintes cohésives à l'extrémité de la fissure augmentent à mesure que la charge appliquée augmente. Mais il y a une limite à la capacité du matériau à empêcher l'ouverture des faces de la fissure. Alors, une fissure dynamique commence à se développer, Barenblatt a trouvé une expression pour le module de cohésion (K_0) :

$$K_0 = \int_0^d \frac{G(t)dt}{\sqrt{t}} \quad (\text{I.43})$$

dans laquelle $G(t)$ est l'intensité de la force cohésive agissant près du bord de la fissure, t est la distance le long de la surface de la fissure prise le long de la normale au bord de la fissure, et d est la largeur de la région soumise aux forces cohésives. A partir de l'intégrale de l'équation (I.43), Barenblatt a pu montrer que

$$K_0 = \sqrt{\pi E \gamma} \quad (\text{I.44})$$

et enfin, le critère de rupture pour la propagation des fissures peut être dérivé comme suit :

$$K_1 = \frac{K_0}{\pi} \quad (\text{I.45})$$

Fondamentalement, le modèle de Dugdale et le modèle de Barenblatt peuvent être classés comme des modèles de fissures cohésives, car pour les deux modèles, il existe une force de fermeture cohésive agissant le long de la zone de processus de fracture (ou zone plastique).

3.3.3 Intégrale-J à deux dimensions

L'intégrale-J a été développée de façon indépendante, en 1967 par Cherepanov[82] et en 1968 par Jim Rice[83]. pour résoudre des difficultés rencontrées dans le calcul des contraintes aux abords d'une fissure dans un matériau linéairement élastique et, aussi de calculer le taux de restitution d'énergie G dans un matériau plastique, lorsque les conditions de la MLER sont respectées (en mode de chargement constant et sans atteindre l'adaptation plastique)

Rice [84] a défini une intégrale curviligne le long d'un contour fermé Γ entourant le front de fissure (figure. I.12), qui est définie de la façon suivante :

$$J = \int_{\Gamma} \left(w dy - \vec{t} \cdot \frac{\partial \vec{u}}{\partial x} ds \right) \quad (\text{I.46})$$

où Γ contour qui entoure la fissure, $\vec{t}$ représente le vecteur contrainte normal au contour, $\vec{u}$ le vecteur des déplacements et ds un segment du contour. w représente la densité d'énergie des déformations :

$$w = \int_0^{\varepsilon_{ij}} \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} \quad (\text{I.47})$$

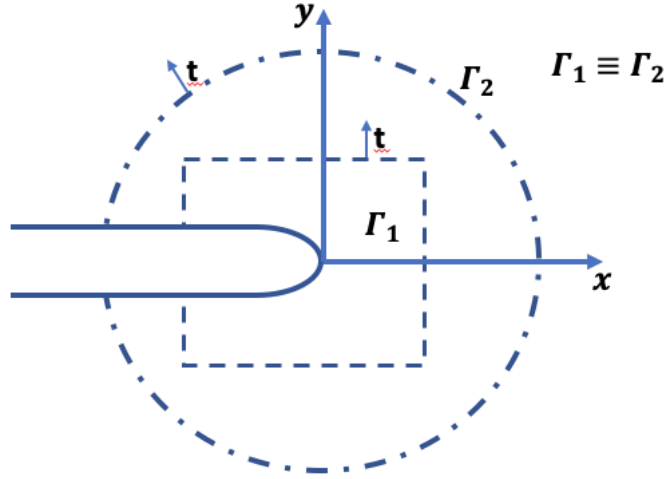


FIGURE I.12 – Front de fissure pour la définition de l'intégrale-J

Ainsi, peu importe le chemin emprunté pour délimiter le contour Γ , Figure. I.12, la quantité obtenue est toujours identique. L'intégrale I.46 est indépendante du contour et l'on montre que si la plasticité est suffisamment confinée :

$$J = G = \frac{K^2}{E'} \quad (\text{I.48})$$

avec $E' = E$ (module de Young) dans le cas d'une déformation plane dans les conditions de chargement correspondant au mode I ;

$$E' = \frac{E}{1 - \nu^2} \quad (\text{I.49})$$

4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les caractéristiques mécaniques d'un matériau pur et defectueux lorsqu'ils sont soumis à une charge. Tout d'abord, nous avons déterminé les caractéristiques de déformation dans le domaine élastique telles que le module de Young, le coefficient de Poisson, le module de cisaillement et le module d'élasticité isostatique. Puis nous avons développé ces caractéristiques pour qu'elles dépendent de trois directions comme le montre la loi de Hooke. Dans la troisième partie, nous avons

abordé la problématique de la fissuration des corps soumis à un champ de contrainte et les concepts de bases et certains outils permettant de calculer le facteur d'intensité de contrainte. Mes contributions se concentrent uniquement sur la déformation élastique, donc les caractéristiques de la déformation plastique ne sont pas traitées dans cette thèse.

Chapitre II

Simulations par la dynamique moléculaire (DM)

La dynamique moléculaire (DM) consiste à étudier la trajectoire d'une molécule en lui appliquant les lois de la mécanique classique newtonienne. Une molécule est considérée comme un assemblage d'atomes dont les positions spatiales varient au cours du temps. Cette technique repose sur l'intégration des équations de mouvements de Newton pour chaque atome.

De nos jours, le domaine d'application de la DM est extrêmement large puisqu'elle permet, entre autres choses, l'étude de propriétés structurales [87], dynamiques [88], et thermiques [89], pour une large variété de systèmes tels que les métaux et les semi-conducteurs [90, 91]. De plus, c'est une technique qui est souvent couplée à des mesures expérimentales pour en faciliter l'interprétation mais qui possède également un fort potentiel prédictif permettant ainsi de motiver la mise en œuvre d'expériences nouvelles. Dans ce chapitre, nous décrirons les principes de base des simulations par la DM à l'aide du logiciel LAMMPS. L'intérêt premier de ce travail est de fournir une description de la méthodologie de simulation pour déterminer les propriétés thermomécaniques des composites bidimensionnels du groupe III et IV.

1 Méthodologie de simulation

1.1 Organigramme du programme DM

L'organigramme du programme DM est illustré dans la figure. II.1. Nous commençons le programme avec l'initialisation dans laquelle nous définissons les paramètres d'entrée (notamment la température, le pas de temps, le temps total de simulation) et les positions et vitesses initiales des particules. Dans l'étape suivante, nous introduisons le noyau du programme de simulation. Les forces sur toutes les particules sont calculées. Ensuite, nous résolvons les équations du mouvement (équation de Newton) et

calculons et enregistrons les quantités que nous voulons mesurer. Nous répétons cette procédure jusqu'à la fin du temps total de simulation. Enfin, nous sauvegardons les valeurs moyennes des observables et la position et la vitesse finales des particules au cas où nous voudrions continuer les simulations plus tard.

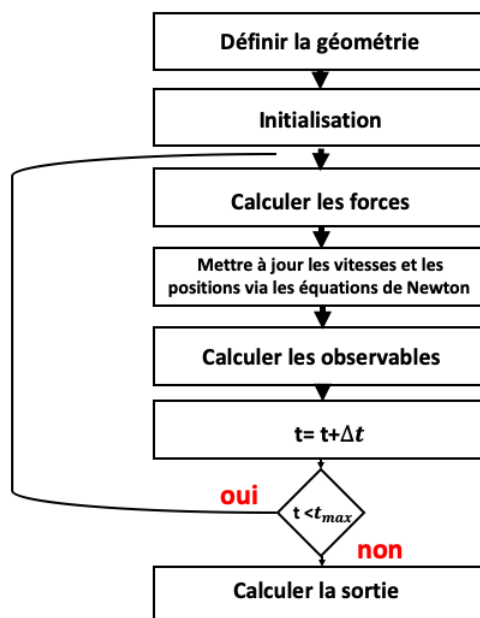


FIGURE II.1 – Organigramme d'un programme typique de dynamique moléculaire

1.2 Contrôle de la température

Une simulation par la dynamique moléculaire (DM) dans sa forme la plus basique consiste en un système avec N particules dans un volume fixe V . Puisque nous résolvons les équations du mouvement de Newton pour les trajectoires des particules et qu'à ce niveau toutes les forces sont conservatrices, l'énergie E dans le système est conservée. Par conséquent, une simulation par la DM conventionnelle est équivalente à un système microcanonique (NVE). Un ensemble NVE correspond à un système isolé (Fig. II.2)). Cependant, dans la plupart des configurations expérimentales, l'échantillon est en équilibre avec son environnement. Par conséquent, nous pouvons effectuer des simulations à une pression de consigne P et/ou une température T (ensemble NVT ou NPT). Dans un ensemble NVT, le système est permis d'échanger de l'énergie avec l'environnement, comme indiqué par les lignes pointillées sur la figure. II.2. Lors de la simulation en NVT, divers types de moyens sont disponibles pour maintenir la température, les vitesses v_i des particules sont mises à l'échelle, de sorte qu'elles représentent

la température correcte selon le théorème d'équipartition :

$$\left\langle \sum_i \frac{1}{2} m v_i^2 \right\rangle = \frac{3}{2} n k_B T, \quad (\text{II.1})$$

où m est la masse ; v_i est la vitesse ; n est le nombre d'atomes dans le système ; k_B est la constante de Boltzmann et T représente la température du système. Divers algorithmes ont été développés pour les simulations NVT, comme les thermostats Berendsen [92], Andersen [93] et Nosé-Hoover [94]. À l'aide du thermostat Berendsen, les vitesses des particules sont progressivement mises à l'échelle vers la température correcte en utilisant une constante de temps qui définit le taux de changement des vitesses. Un thermostat Anderson ajuste aléatoirement les vitesses des particules échantillonnées à partir d'une distribution de Maxwell. Les thermostats Berendsen et Andersen sont faciles à mettre en œuvre et garantiront un équilibrage rapide vers la température choisie. Cependant, le thermostat de Berendsen ne conduit pas à une distribution canonique (Maxwell-Boltzmann) de la vitesse. À l'aide du thermostat Andersen, les vitesses des particules sont ajustées de manière aléatoire. Par conséquent, ce thermostat est inapproprié si l'on veut étudier les propriétés de transport du système, comme la diffusion des particules. De plus, les deux thermostats ne conservent pas l'énergie dans le système. Un thermostat Nosé-Hoover est un algorithme pour ajuster les équations du mouvement qui conduit à la bonne distribution canonique, tandis que les vitesses sont ajustées en douceur. Par conséquent, en utilisant un thermostat Nosé Hoover, les propriétés de transport peuvent être sondées de manière plus réaliste que pour un thermostat Anderson. Cependant, pour l'étude des propriétés de transport, il est toujours préférable d'effectuer les simulations dans NVE [85], car dans NVE, la dynamique du système n'est pas affectée par les paramètres de contrôle définis par l'utilisateur. Dans la DM isotherme-isobare, ou NPT DM, la température T et la pression P sont contrôlées respectivement à l'aide d'un thermostat et d'un barostat. NPT DM équivaut à un système à piston fermé qui permet d'échanger de l'énergie cinétique avec l'environnement. Dans les simulations par la DM barostatées, le volume de la boîte de simulation varie pour ajuster la pression dans le système, comme indiqué par les flèches sur la figure. II.2. Pour incorporer un barostat dans la DM, divers algorithmes ont été développés (voir par exemple [95]). Toxvaerd a développé un algorithme qui minimise le changement de dynamique et conduit aux fluctuations correctes dans le système [96].

Dans les simulations grand canonique, ou μ VT DM, le potentiel chimique, le volume et la température sont maintenus constants. Comme NPT DM, μ VT DM correspond à la plupart des situations de laboratoire : Le système étudié est en équilibre avec l'environnement. Le potentiel chimique peut être mesuré et contrôlé à l'aide de méthode d'insertion de particules Widom [97]. Dans cette méthode, des particules de test

virtuelles sont insérées et retirées de la boîte de simulation. La différence d'énergie potentielle avant et après l'insertion ou le retrait conduit à l'excès de potentiel chimique. Cette méthode, cependant, ne fonctionne pas pour les systèmes à haute densité [85], car l'insertion de particules virtuelles entraînera de grandes variations dans l'énergie potentielle mesurée.

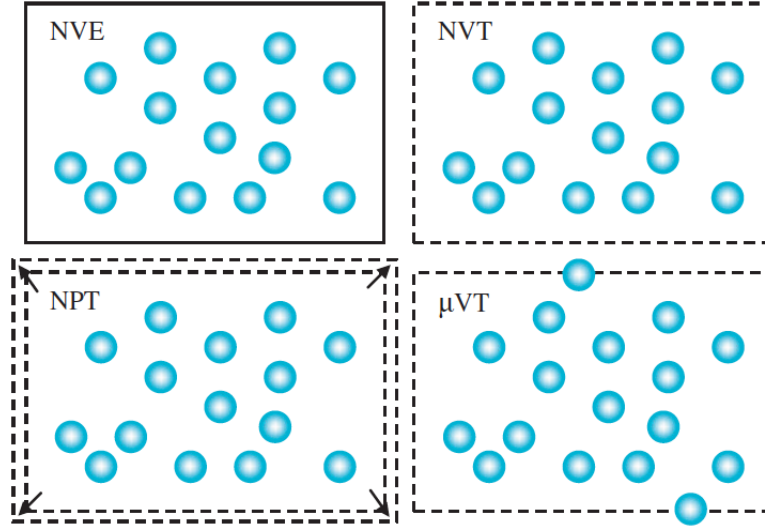


FIGURE II.2 – Les différents ensembles utilisés dans les simulations par la DM

1.3 Condition périodique aux limites et principe de la simulation

En Dynamique Moléculaire, nous voulons sonder les propriétés d'un système macroscopique ou d'un système moléculaire en équilibre avec son environnement macroscopique. Néanmoins, le nombre de particules qui peuvent être manipulées en DM est limité à quelques millions au maximum. Par conséquent, nous avons besoin de conditions aux limites qui agissent comme un environnement en volume infini. On y parvient en appliquant des conditions aux limites périodiques [85, 86]. Lorsque nous utilisons des conditions aux limites périodiques, une particule interagit avec toutes les particules situées dans la distance de coupure. En pratique, cela signifie que, lorsqu'une particule est située à la limite de la boîte, elle interagit avec les particules situées de l'autre côté de la boîte (indiquées par les flèches rouges de la figure. II.3). De plus, lorsqu'une particule sort de la boîte, elle réapparaît de l'autre côté de la boîte (flèches noires sur la figure. II.3). De cette façon, nous simulons un système en volume infini.

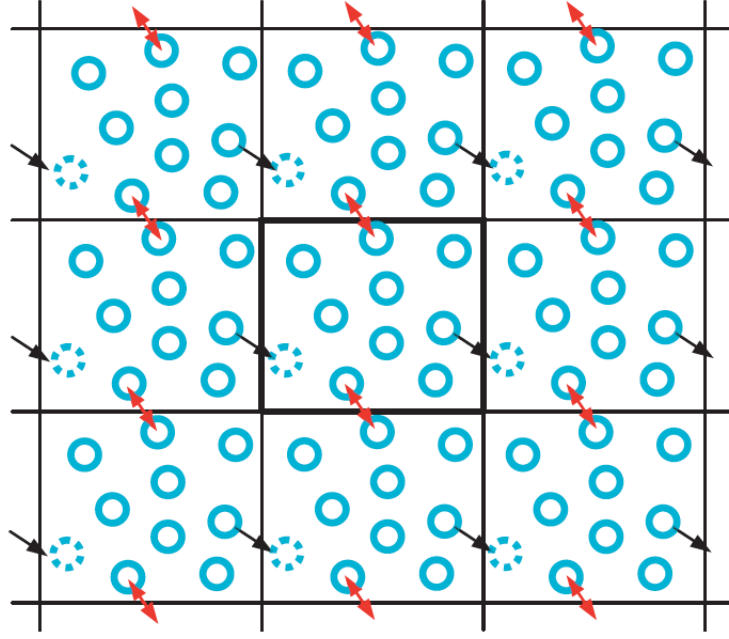


FIGURE II.3 – Représentation schématique des conditions aux limites périodiques dans les simulations par la DM

La simulation par la dynamique moléculaire est basée sur la deuxième loi de Newton :

$$F_i = m_i a_i, \quad (\text{II.2})$$

où F_i , m_i et a_i sont respectivement la force, la masse et l'accélération de l'atome i . Puisque la force sur chaque atome est déterminée à partir des potentiels, l'accélération de chaque atome pourrait être calculée. Ainsi, l'intégration de l'équation de chaque atome donne les trajectoires (positions, vitesses et accélérations) de chaque atome en fonction du temps. Ainsi, les valeurs moyennes des propriétés du système ont pu être déterminées. Nous n'avons besoin que de la position et de la vitesse initiales du système comme entrée pour la simulation par la DM.

La force de chaque atome peut être calculée au moyen d'un potentiel interatomique donné, comme suit :

$$F_i = -\nabla_i V_i, \quad (\text{II.3})$$

où V représente le potentiel interatomique. La combinaison des équations II.2 et II.3 pourrait donner :

$$-\frac{dV}{dr_i} = m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2}, \quad (\text{II.4})$$

où r_i représente la position du i ème atome.

2 Potentiels interatomiques

À partir de tout ce qui précède, nous avons pu voir que l'entrée la plus importante pour la simulation par la DM est le potentiel interatomique V . Différents matériaux auraient un V distinct. Alors que la précision du potentiel déterminerait directement la fiabilité des résultats de la simulation, les potentiels interatomiques sont généralement écrits comme l'expansion en série de termes fonctionnels qui dépendent de la position d'un, deux, trois ou N atomes à la fois. Les potentiels fréquemment utilisés pour la simulation en ce qui concerne les métaux sont des potentiels à deux corps, traitant l'énergie globale du système comme une somme d'interactions atomiques par paires et de potentiels à plusieurs corps en additionnant un plus grand groupe d'atomes.

2.1 Potentiel de Lennard-Jones

Le potentiel de Lennard-Jones a été proposé pour la première fois en 1924 par John Edward Lennard-Jones, il décrit l'énergie potentielle d'interaction entre deux atomes ou molécules non liés en fonction de leur distance de séparation.

Le potentiel Lennard-Jones [98–100] est un potentiel classique à deux corps qui pourrait être exprimé comme suit :

$$V_{ij}(r) = 4\varepsilon_{ij} \left(\left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^6 \right), \quad (\text{II.5})$$

ou est parfois exprimé sous la forme :

$$V(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6} \quad (\text{II.6})$$

où V est le potentiel intermoléculaire entre les deux atomes ou molécules. r est la distance de séparation entre les deux particules (mesurée du centre d'une particule au centre de l'autre particule), ε_{ij} représente la profondeur du potentiel d'interaction, (généralement appelée "énergie de dispersion") et une mesure de la force d'attraction des deux particules, σ_{ij} est l'espacement entre les particules lorsque le potentiel par paire est égal à zéro. σ_{ij} donne une mesure de la proximité de deux particules non liantes et est donc appelé rayon de van der Waals. Il est égal à la moitié de la distance internucléaire entre les particules non liées.

Le potentiel de Lennard-Jones peut être divisé en deux parties : une partie attractive (le terme à la puissance 6, porte le nom d'interaction de Van der Waals) et une partie répulsive (le terme à la puissance 12). Il convient de mentionner que le modèle de Lennard-Jones 12-6 n'est pas la représentation la plus fidèle de la surface d'énergie potentielle, mais que son utilisation est très répandue en raison de sa rapidité de calcul.

De plus, le potentiel par paire nécessite généralement moins de sources informatiques que les potentiels à plusieurs corps. Le potentiel Lennard-Jones a son minimum à une distance de $r = r_m = 2^{1/6}\sigma \approx 1.12246 \sigma$, où l'énergie potentielle a la valeur $V = -\epsilon$ (cf. Figure. II.4).

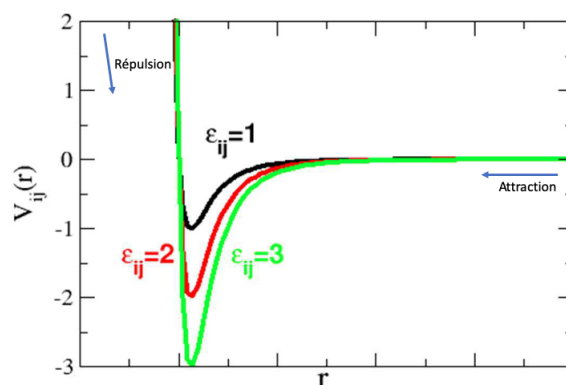


FIGURE II.4 – Graphique de la fonction potentielle de Lennard-Jones

Potentiel de liaison

Le potentiel de Lennard-Jones est fonction de la distance entre les centres de deux particules. Lorsque deux particules non liantes sont séparées par une distance infinie, la possibilité qu'elles se rencontrent et interagissent est minime. Pour des raisons de simplicité, leur énergie potentielle de liaison est considérée comme nulle. Cependant, à mesure que la distance de séparation diminue, la probabilité d'interaction augmente. Les particules se rapprochent jusqu'à ce qu'elles atteignent une région de séparation où les deux particules sont liées ; leur énergie potentielle de liaison passe de zéro à une quantité négative. Pendant que les particules sont liées, la distance entre leurs centres continue de diminuer jusqu'à ce que les particules atteignent un équilibre, spécifié par la distance de séparation à laquelle l'énergie potentielle minimale est atteinte. Si les deux particules liées sont davantage pressées l'une contre l'autre, au-delà de leur distance d'équilibre, la répulsion commence à se produire : les particules sont si proches que leurs électrons sont forcés d'occuper les orbitales de l'autre. La répulsion se produit lorsque chaque particule tente de conserver l'espace dans ses orbitales respectives (cf. Figure. II.5) Malgré la force de répulsion entre les deux particules, leur énergie potentielle de liaison augmente rapidement à mesure que la distance de séparation diminue [102].

Stabilité et force des interactions

Comme l'énergie potentielle de liaison, la stabilité d'un arrangement d'atomes est fonction de la distance de séparation Lennard-Jones. Lorsque la distance de séparation diminue en dessous de l'équilibre, l'énergie potentielle devient de plus en plus

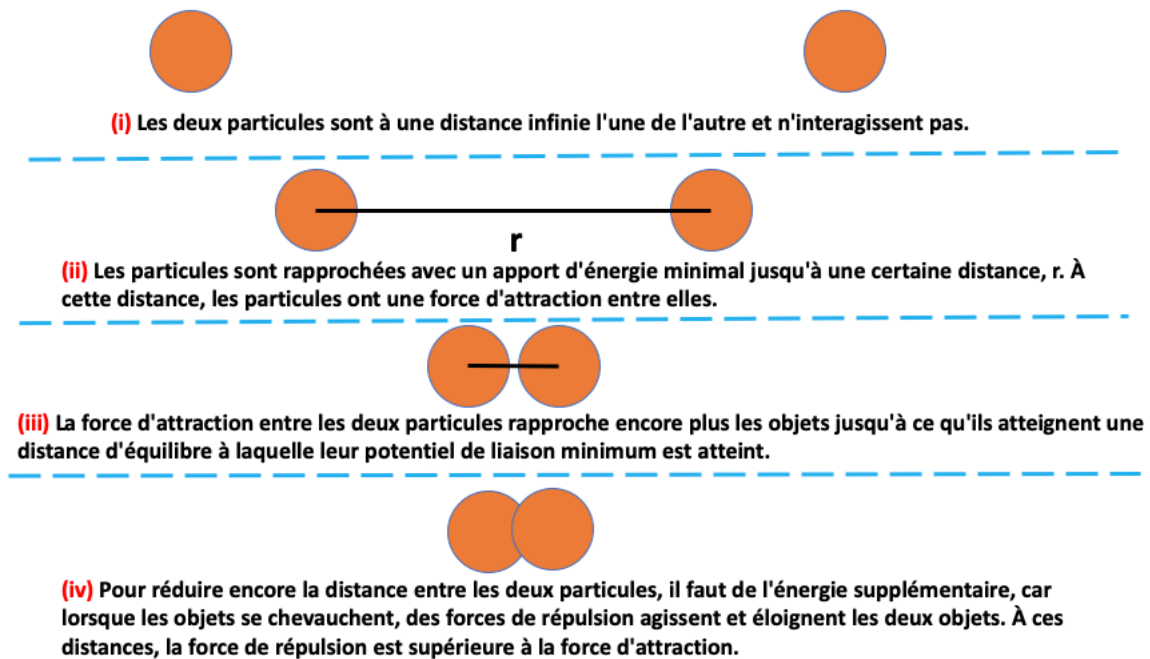


FIGURE II.5 – Un scénario similaire à celui qui se déroule dans les atomes et molécules neutres et qui est souvent décrit par le potentiel de Lennard-Jones.

positive (indiquant une force répulsive). Une énergie potentielle aussi importante est énergiquement défavorable, car elle indique un chevauchement des orbitales atomiques. Cependant, à de longues distances de séparation, l'énergie potentielle est négative et s'approche de zéro lorsque la distance de séparation augmente jusqu'à l'infini (ce qui indique une force d'attraction). Cela indique qu'à de longues distances, la paire d'atomes ou de molécules subit une petite force de stabilisation. Enfin, lorsque la séparation entre les deux particules atteint une distance légèrement supérieure à σ , l'énergie potentielle atteint une valeur minimale (indiquant une force nulle). À ce stade, la paire de particules est la plus stable et restera dans cette orientation jusqu'à ce qu'une force extérieure soit exercée sur elle [101, 103] (cf. Figure. II.6).

Les potentiels de corps multiples, quant à eux, tiennent compte des interactions entre les atomes par paires. Les potentiels de Stillinger weber (SW) [104–106] et Tersoff [107, 108] sont deux des principaux types de potentiels de corps multiples, qui ont été utilisés dans les simulations effectuées dans cette thèse par le biais du logiciel LAMMPS.

2.2 Potentiel de Stillinger-Weber

Le potentiel SW est basé sur deux termes qui représentent l'interaction entre deux particules et trois particules, respectivement comme indiqué dans l'équation. II.7, où $\phi_2(r_{ij})$ est un terme à deux corps et $\phi_3(r_{ij})$ est un terme à trois corps, qui décrivent

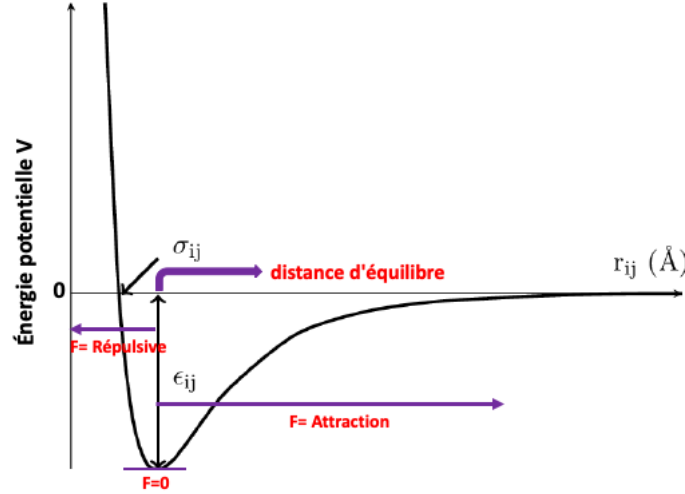


FIGURE II.6 – Potentielle de Lennard-Jones avec la presentation de la force des interactions.

les interactions de liaison et d'angle, respectivement. Les termes r_{ij} et r_{ik} indiquent les séparation des paires et θ_{ijk} est l'angle formé par la liaison ij et la liaison ik . Ce potential est paramétré sur la base du champ de force de valence et du spectre de phonons calculé [109, 110].

$$E = \sum_i \sum_{j>i} \phi_2(r_{ij}) + \sum_i \sum_{j \neq i} \sum_{k>j} \phi_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk}), \quad (\text{II.7})$$

$$\phi_2(r_{ij}) = A \left(\frac{B}{r_{ij} - 1} \right) \exp \left[\frac{\rho}{r_{ij} - r_{max}} \right], \quad (\text{II.8})$$

$$\phi_3(\theta_{ijk}) = K e^{[\rho_1/(r_{ij}-r_{max12}) + \rho_2/(r_{ik}-r_{max13})]} (\cos \theta_{ijk} - \cos \theta_0)^2 \quad (\text{II.9})$$

où ϕ_2 correspond à l'étirement de la liaison et ϕ_3 s'associe à la flexion de l'angle. Les rayons de coupure r_{max} , r_{max12} et r_{max13} sont déterminés géométriquement par la structure du matériau. Il y a cinq paramètres géométriques inconnus, c'est-à-dire ρ et B dans le terme ϕ_2 à deux corps et ρ_1 , ρ_2 et θ_0 dans le terme ϕ_3 à trois corps, et deux paramètres énergétiques A et K . Il existe une contrainte parmi ces paramètres en raison de la condition d'équilibre [111],

$$\rho = \frac{-4B(d - r_{max})^2}{(Bd - d^5)}, \quad (\text{II.10})$$

où d est la longueur de la liaison à l'équilibre d'après les expériences. L'équation (II.10) garantit que la liaison a une longueur d'équilibre de d et que l'interaction $\sum \phi_2$ pour

cette liaison est à l'état d'énergie minimale à la configuration d'équilibre.

Les paramètres d'énergie A et K dans le potentiel SW peuvent être obtenus analytiquement du modèle Valence Force Field (VFF) comme suit,

$$A = \frac{K_r}{\alpha e^{[\rho/(d-r_{max})]}}, \quad (\text{II.11})$$

$$K = \frac{K_\theta}{2 \sin^2 \theta_0 e^{[\rho_1/(d_1-r_{max12})+\rho_2/(d_2-r_{max13})]}}, \quad (\text{II.12})$$

où le coefficient α dans l'équation (II.11) est,

$$\begin{aligned} \alpha = & \left[\frac{\rho}{(d-r_{max})^2} \right]^2 (B/d^4 - 1) \\ & + \left[\frac{2\rho}{(d-r_{max})^3} \right] (B/d^4 - 1) \\ & + \left[\frac{\rho}{(d-r_{max})^2} \right] \left(\frac{8B}{d^5} \right) + \left(\frac{20B}{d^6} \right). \end{aligned} \quad (\text{II.13})$$

Dans certaines situations, le potentiel SW s'écrit également sous la forme suivante,

$$\phi_2(r_{ij}) = \epsilon A_L \left(B_L \sigma^p r_{ij}^{-p} - \sigma^q r_{ij}^{-q} \right) e^{[\sigma/(r_{ij}-a\sigma)]}, \quad (\text{II.14})$$

$$\begin{aligned} \phi_3(\theta_{ijk}) = & \epsilon \lambda e^{[\gamma\sigma/(r_{ij}-a\sigma)+\gamma\sigma/(r_{jk}-a\sigma)]} \\ & (\cos \theta_{ijk} - \cos \theta_0)^2. \end{aligned} \quad (\text{II.15})$$

Les paramètres ici peuvent être déterminés en comparant les formes de potentiel SW dans les équations. (II.14) et (II.15) avec les équations. (II.8) et (II.9). Il est évident que $p = 4$ et $q = 0$. Equations. (II.14) et (II.15) ont deux paramètres de plus que les équations. (II.8) et (II.9), nous pouvons donc définir $\epsilon = 1.0$ eV et $\gamma = 1.0$. Les autres paramètres des Eqs. (II.14) et (II.15) sont liés à ces paramètres dans les équations. (II.8) et (II.9) par les équations suivantes

$$\begin{aligned} A_L &= A \\ \sigma &= \rho \\ B_L &= B/\rho^4 \\ a &= r_{\max}/\rho \\ \lambda &= K \end{aligned} \quad (\text{II.16})$$

En gardant à l'esprit que l'énergie de liaison n'est pas seulement liée à la distance entre les atomes, mais également liée aux angles de liaison sous-tendus par cette liaison

donnée et d'autres liaisons [110]. D'autre part, un immense effort a récemment été consacré au développement d'un potentiel SW approprié pour les matériaux 2D, et de nombreuses paramétrisations de nanomatériaux de haute précision ont été explorées en conséquence [109].

2.3 Potentiel de Tersoff

Le potentiel de Tersoff est une fonction potentielle à trois corps qui inclut explicitement une contribution angulaire de la force. Il s'écrit sous la forme suivante [112] :

$$E = \sum_i^N \sum_{j \neq i} E_i = \frac{1}{2} \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N V_{ij}, \quad (\text{II.17})$$

$$V_{ij} = f_C(r_{ij})[f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})], \quad (\text{II.18})$$

où l'énergie potentielle est décomposée en une énergie de site E_i ou une énergie de liaison V_{ij} , r_{ij} est une distance entre les atomes i et j , f_A et f_R sont respectivement le potentiel de paire attractif et répulsif, et f_C est une fonction de coupure lisse.

$$f_R(r) = Ae^{(-\lambda_1 r)} \quad (\text{II.19})$$

$$f_A(r) = -Be^{(-\lambda_2 r)} \quad (\text{II.20})$$

Ici, A , B , λ_1 et λ_2 sont des paramètres réglables

La fonction de coupure est définie comme :

$$f_C(r) = \begin{cases} 1, & r < R - D \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin(\frac{\pi}{2}(r - R)/D), & R - D < r < R + D \\ 0, & r > R + D \end{cases} \quad (\text{II.21})$$

R et D sont également des paramètres ajustables, qui spécifient la position et la largeur de la région de coupure. Ils sont typiquement choisis de manière à inclure uniquement la première coquille de coordination dans la sommation présente dans l'équation (II.17) pour la structure sélectionnée (pour le carbone $R = 1.8\text{\AA}$). La fonction de coupure élimine en douceur les contributions des paires d'atomes, qui sont séparées de plus de $R + D$, c'est-à-dire, la fonction f_C décroît de 1 à 0 dans le domaine $R - D < r < R + D$. La principale caractéristique de ce potentiel est la présence du terme b_{ij} . Ce terme signifie essentiellement que la force de chaque lien dépend de l'environnement local

et diminue lorsque le nombre de voisins devient élevé. Cette dépendance peut être exprimée par

$$b_{ij} = \frac{1}{(1 + \beta^n \zeta_{ij}^n)^{1/2n}} \quad (\text{II.22})$$

où

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i,j}^N f_C(r_{ik}) h(r_{ij} - r_{ik}) g(\cos \theta_{jik}) \quad (\text{II.23})$$

La fonction $h(r)$ est définie comme suit :

$$h(r) = \exp(\lambda_3^m r^m) \quad (\text{II.24})$$

Les symboles β , n , λ_3 et m représentent d'autres paramètres. En raison de la non-linéarité présente dans la définition du terme b_{ij} (équation (II.22)), le potentiel de Tersoff est un potentiel à plusieurs corps. La fonction $g(\cos \theta)$ décrit la dépendance angulaire et est définie comme :

$$g(\cos \theta) = \gamma \left(1 + \frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{d^2 + (\cos \theta - \cos \theta_0)^2} \right) \quad (\text{II.25})$$

La fonction angulaire $g(\cos \theta)$ est déterminée par les paramètres γ , c , d et θ_0 . Par conséquent, quatorze paramètres au total doivent être spécifiés pour un système à un seul élément. Il existe de nombreuses paramétrisations différentes du potentiel de Tersoff disponibles dans la littérature, principalement pour les éléments du groupe IV [113–117]. Cependant, certaines paramétrisations pour les éléments des groupes III et V existent également [118–123].

Généralement, le potentiel à plusieurs corps est capable de décrire des interactions atomiques plus précises tout en exigeant plus de sources de calcul.

Bref, dans un système d'atomes, ces potentiels interatomiques sont utilisés pour mettre à jour l'énergie de chaque atome. Ensuite, les forces agissant sur chaque atome individuel sont dérivées de ces énergies. De même, leur accélération est déterminée par la force interatomique nette divisée par la masse de l'atome. Les vitesses peuvent également être calculées en multipliant l'accélération et le temps. Une fois que les forces agissant sur les atomes sont connues, les positions des atomes peuvent être mises à jour. Enfin, les calculs sont refaits pour les nouvelles positions.

3 Intégration des équations du mouvement

Étant donné que l'énergie potentielle est fonction de la position de tous les atomes dans le système, il est peu pratique d'intégrer les équations du mouvement de Newton. Ainsi, nous avons recours à la résolution numérique d'un tel ensemble d'équations de mouvements. L'algorithme pour une telle solution numérique doit acquérir les caractéristiques suivantes : (1) l'énergie et la quantité de mouvement du système doivent être conservées ; (2) le calcul est efficace ; (3) les erreurs d'arrondi doivent être suffisamment faibles pour permettre une intégration précise sur une longue période.

Pour simplifier la notation, nous considérons le mouvement d'une particule en une dimension. La première étape dans l'application des divers schémas numériques qui émanent de la méthode d'Euler consiste à écrire les équations du mouvement de Newton sous la forme de deux équations différentielles couplées du premier ordre

$$\frac{dv}{dt} = a(t), \text{ et } \frac{dx}{dt} = v(t) \quad (\text{II.26})$$

où $a(t) \equiv a(x(t), v(t), t)$. Nous laissons Δt être l'intervalle de temps entre de pas de temps successifs et a_n , v_n , et x_n être les valeurs de l'accélération a , de la vitesse v , et de la position de la particule x au temps $t_n = t_0 + n\Delta t$, par exemple, $a_n = a(x_n, v_n, t_n)$. Le but des méthodes de différences finies est de déterminer la valeur de x_{n+1} et v_{n+1} au temps $t_{n+1} = t_n + \Delta t$. Δt doit être choisi de manière à ce que la méthode d'intégration génère une solution stable. Si le système est conservatif, Δt doit être suffisamment petit pour que l'énergie totale soit conservée.

La nature de nombreux algorithmes d'intégration peut être comprise en développant $v_{n+1} = v(t_n + \Delta t)$ et $x_{n+1} = x(t_n + \Delta t)$ dans une série de Taylor :

$$v_{n+1} = v_n + a_n \Delta t + \mathcal{O}[(\Delta t)^2], \quad (\text{II.27})$$

$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t + \frac{1}{2} a_n (\Delta t)^2 + \mathcal{O}[(\Delta t)^3]. \quad (\text{II.28})$$

3.1 Méthode d'Euler

La méthode d'Euler est une intégration numérique plus fondamentale, est une procédure numérique pour résoudre par approximation des équations différentielles du premier ordre avec une condition initiale.

L'algorithme d'Euler de base équivaut à retenir les termes $\mathcal{O}(\Delta t)$ dans les équations

(II.27), (II.28), dont les équations sont les suivantes [124]

$$v_{n+1} = v_n + a_n \Delta t \quad (\text{II.29})$$

$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t \quad (\text{II.30})$$

Comme les termes d'ordre Δt sont conservés dans les équations (II.29), (II.30), l'erreur locale, c'est-à-dire l'erreur dans un pas de temps, est d'ordre $(\Delta t)^2$. L'erreur globale, l'erreur totale sur le temps d'intérêt, due à l'accumulation des erreurs d'un pas à l'autre est d'ordre Δt . Cette estimation de l'erreur globale découle du fait que le nombre d'étapes en lesquelles le temps total est divisé est proportionnel à $1/\Delta t$. Par conséquent, l'ordre de l'erreur globale est réduit d'un facteur de $1/\Delta t$ par rapport à l'erreur locale. Nous disons qu'une méthode est d'ordre n si son erreur globale est d'ordre $(\Delta t)^n$. Ainsi, la méthode d'Euler est un exemple de méthode du premier ordre et est également asymétrique car elle fait avancer la solution d'un pas de temps Δt , mais n'utilise les informations sur la dérivée qu'au début de l'intervalle. De plus, la précision de la méthode d'Euler est limitée et ses solutions sont souvent instables.

Méthode d'Euler–Cromer

Est une variante de la méthode d'Euler par le fait d'utiliser v_{n+1} et non v_n dans l'équation (II.30) (cas de la méthode d'Euler) dans le calcul de mise à jour de x_{n+1} . Qui donne des solutions stables pour les systèmes oscillants et conduit aux équations différentielles suivantes

$$v_{n+1} = v_n + a_n \Delta t \quad (\text{II.31})$$

$$x_{n+1} = x_n + v_{n+1} \Delta t \quad (\text{II.32})$$

Comme l'a souligné Cromer [125], cette simple modification permet de conserver l'énergie pour les problèmes oscillatoires (contrairement à la méthode d'Euler qui augmente artificiellement l'énergie de l'oscillateur avec le temps).

3.2 Méthodes du Point Médian et Demi-Pas

Une façon de penser à la méthode d'Euler est qu'elle utilise la dérivée au point de solution actuel (t_0, x_0) pour créer une prédiction linéaire de la solution au prochain instant t_1 . C'est comme essayer de dessiner une courbe en utilisant une séquence de

3. Intégration des équations du mouvement

segments de ligne droite. Ce ne sera jamais exact, et une bonne approximation peut nécessiter des segments de ligne très courts, surtout si la courbe est "sinueuse".

La méthode du point médian (Midpoint method) est parfois aussi connue sous le nom de méthode d'Euler modifiée [126] tente d'améliorer la prédiction. Pour ce faire, elle utilise la vitesse moyenne pendant l'intervalle dans la méthode d'Euler pour obtenir la nouvelle position. Les équations correspondantes peuvent être écrites comme suit

$$\begin{aligned}v_{n+1} &= v_n + a_n \Delta t, \\x_{n+1} &= x_n + \frac{1}{2} (v_{n+1} + v_n) \Delta t.\end{aligned}\tag{II.33}$$

Notez que si l'on substitue l'Eq. (II.33) pour v_{n+1} dans l'Eq. (II.33), on obtient

$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t + \frac{1}{2} a_n (\Delta t)^2.\tag{II.34}$$

Par conséquent, la méthode du point médian donne une précision du second ordre pour la position et du premier ordre pour la vitesse. Bien que l'approximation du point médian donne des résultats exacts pour une accélération constante, elle ne donne généralement pas de meilleurs résultats que la méthode d'Euler. En fait, les deux méthodes sont également médiocres, car l'erreur augmente à chaque pas de temps.

Méthode du Demi-Pas

Le fait d'adopter une taille de pas plus petite ne réduit pas beaucoup notre erreur car, bien que nous ayons réduit notre erreur de moitié, nous en additionnons deux fois plus. Une façon d'aller plus loin que la méthode d'Euler lorsque cela se produit est d'utiliser une méthode de second ordre. Une façon intelligente de faire est la méthode du demi-pas, la plus simple d'une série d'approches d'ordre supérieur connues sous le nom de méthodes Runge-Kutta. Dans cette méthode, la vitesse moyenne pendant un intervalle est considérée comme étant la vitesse au milieu de l'intervalle. La méthode à demi-pas peut s'écrire comme suit

$$v_{n+\frac{1}{2}} = v_{n-\frac{1}{2}} + a_n \Delta t\tag{II.35}$$

$$x_{n+1} = x_n + v_{n+\frac{1}{2}} \Delta t\tag{II.36}$$

Notez que la méthode du demi-pas n'est pas auto-démarrante (Not Self-Starting), c'est-à-dire qu'elle dépend des informations précédentes contrairement à la méthode d'Euler qui considère comme auto-démarrante (il n'y a aucune dépendance sur autre chose que le pas de temps actuel). Regardez l'équation (II.35), vous voyez qu'elle ne nous permet

pas de calculer $v_{\frac{1}{2}}$.

Le problème peut être résolu en adoptant l'algorithme d'Euler pour la première demi-étape

$$v_{\frac{1}{2}} = v_0 + \frac{1}{2}a_0\Delta t \quad (\text{II.37})$$

3.3 Méthode de Leapfrog Verlet

Méthode de Verlet

Une fois que nous connaissons les forces agissant sur toutes les particules, nous pouvons résoudre les équations du mouvement. Pour cela, nous avons besoin d'un algorithme qui conserve l'énergie du système (et qui est donc réversible dans le temps), qui est peu coûteux en calcul et est stable pendant de longues périodes. Parmi les algorithmes le plus couramment utilisé en DM, nous trouvons l'algorithme de Verlet [127, 128]. L'idée fondamentale d'un tel algorithme est de développer la position de la particule dans le pas de temps précédant et suivant dans la série de Taylor pour réduire le taux d'erreur introduite par l'intégration :

$$x_{n+1} = x_n + v_n\Delta t + \frac{1}{2}a_n(\Delta t)^2 + \frac{1}{6}b_n\Delta t^3 + \mathcal{O}(\Delta t^4). \quad (\text{II.38})$$

et

$$x_{n-1} = x_n - v_n\Delta t + \frac{1}{2}a_n(\Delta t)^2 - \frac{1}{6}b_n\Delta t^3 + \mathcal{O}(\Delta t^4). \quad (\text{II.39})$$

avec x la position, v la vitesse, a la accélération, b est l'à-coup (unité S.I., dérivée troisième de la position par rapport au temps t) souvent oublié.

En additionnant ces deux équations (II.38), (II.39) on obtient :

$$x_{n+1} + x_{n-1} = 2x_n + a_n(\Delta t)^2 + \mathcal{O}[(\Delta t)^4], \quad (\text{II.40})$$

ou

$$x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + a_n(\Delta t)^2. \quad (\text{II.41})$$

Nous pouvons voir que les termes d'ordre 1 et 3 de l'expansion de Taylor s'annulent, ce qui rend l'intégrateur de Verlet un ordre plus précis que l'intégration par simple expansion de Taylor. L'erreur de cet algorithme est $(\Delta t)^4$. Les étapes de l'intégration de Verlet sont présentées dans la figure (II.7) comme suit : a) comme point de départ, nous avons besoin de la position du pas de temps actuel et précédent ; b) nous calculons

3. Intégration des équations du mouvement

les forces du pas de temps actuel à partir des positions actuelles ; c) nous déterminons les nouvelles positions à partir des positions actuelles et précédentes et des forces actuelles.

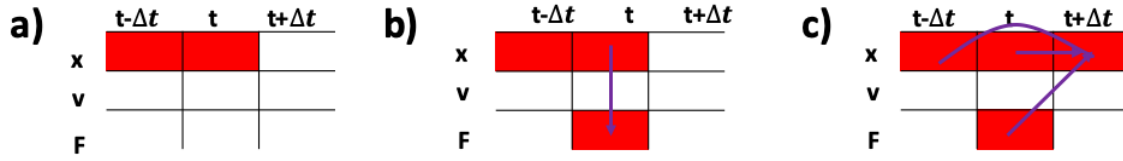


FIGURE II.7 – Représentation schématique des étapes de l'algorithme de Verlet.

Méthode de Stormer-Verlet

Les vitesses ne sont pas explicitement données dans l'équation de base de Verlet, mais elles sont souvent nécessaires pour le calcul de certaines quantités physiques comme l'énergie cinétique. Nous pouvons trouver la vitesse avec une précision de $(\Delta t)^2$ en utilisant la méthode de Stormer-Verlet, qui est la même que précédemment, mais nous calculons la vitesse de la manière suivante

la soustraction des séries de Taylor pour x_{n+1} et x_{n-1} donne

$$v_n = \frac{x_{n+1} - x_{n-1}}{2\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (\text{II.42})$$

Notez que le 2 dans le dénominateur apparaît parce que nous allons sur 2 pas de temps. Il s'agit essentiellement de résoudre $v = \frac{\Delta x}{\Delta t}$. Plus détaillé, mentionner que ce terme de vitesse est un pas derrière le terme de position, puisqu'il s'agit de la vitesse au temps t , pas $t + \Delta t$, ce qui signifie que $v_n = \frac{x_{n+1} - x_{n-1}}{2\Delta t}$ est une approximation de second ordre de $v(t_n)$. Avec le même argument, mais en divisant par deux le pas de temps, $v_{n+1/2} = \frac{x_{n+1} - x_n}{\Delta t}$ est une approximation du second ordre de $v(t_{n+1/2})$, avec $t_{n+1/2} = t_n + \frac{1}{2}\Delta t$.

On peut raccourcir l'intervalle pour approcher la vitesse au temps $t + \Delta t$ au détriment de la précision :

$$v_{n+1} = \frac{x_{n+1} - x_n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t). \quad (\text{II.43})$$

Cependant, l'erreur pour ceci est Δt ce qui est assez faible, mais permet de faire le travail.

Maintenant, disons que nous avons réellement besoin de la vitesse pour calculer le prochain pas de temps. Eh bien, dans ce cas, nous ne pouvons tout simplement pas utiliser l'approximation ci-dessus. Cela peut créer des défis techniques dans les simulations de dynamique moléculaire. Cette insuffisance peut être traitée en utilisant l'algorithme de

Verlet-Vitesse [129].

Méthode de Verlet-Vitesse

L'algorithme de Verlet-Vitesse (Velocity Verlet) fournit à la fois les positions atomiques et les vitesses au même instant, est auto-démarrant (self-starting) et minimise les erreurs d'arrondi, et pour ces raisons, il peut être considéré comme la forme la plus complète de l'algorithme de Verlet. Les équations de base sont les suivantes :

$$x_{n+1} = x_n + v_n \Delta t + \frac{1}{2} a_n (\Delta t)^2, \quad (\text{II.44})$$

$$v_{n+1} = v_n + \frac{1}{2} (a_{n+1} + a_n) \Delta t. \quad (\text{II.45})$$

Nous pouvons obtenir les équations (II.44), (II.45) à partir des équations (II.41), (II.42) par les considérations suivantes. Nous résolvons d'abord l'Eq. (II.42) pour x_{n-1} et nous écrivons $x_{n-1} = x_{n+1} - 2v_n \Delta t$. Si nous substituons cette expression pour x_{n-1} dans l'Eq. (II.41) et nous résolvons pour x_{n+1} , nous trouvons la forme Eq. (II.44). Nous utilisons alors l'Eq. (II.42) pour écrire v_{n+1} comme suit

$$v_{n+1} = \frac{x_{n+2} - x_n}{2\Delta t}, \quad (\text{II.46})$$

et nous utilisons Eq. (II.41) pour obtenir $x_{n+2} = 2x_{n+1} - x_n + a_{n+1}(\Delta t)^2$. Si nous substituons cette forme pour x_{n+2} dans l'équation (II.46), nous obtenons

$$v_{n+1} = \frac{x_{n+1} - x_n}{\Delta t} + \frac{1}{2} a_{n+1} \Delta t. \quad (\text{II.47})$$

Enfin, nous utilisons Eq. (II.44) pour x_{n+1} pour éliminer $x_{n+1} - x_n$ de l'Eq. (II.47) ; après un peu d'algèbre, nous obtenons le résultat souhaité Eq. (II.45).

Nous pouvons montrer que l'erreur dans le Verlet-vitesse est du même ordre que dans le Störmer- Verlet. Notez que l'algorithme de Vitesse ne consomme pas nécessairement plus de mémoire, car il n'est pas nécessaire de garder une trace de la vitesse à chaque pas de temps pendant la simulation.

Le schéma standard de mise en œuvre de cet algorithme est le suivant :

1. Calculer : $v_{n+\frac{1}{2}} = v_n + \frac{1}{2} a_n \Delta t$ (*)
2. Calculer : $x_{n+1} = x_n + v_{n+\frac{1}{2}} \Delta t$ (◇)
3. Obtenir a_{n+1} à partir du potentiel d'interaction en utilisant x_{n+1}
4. Calculer : $v_{n+1} = v_{n+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} a_{n+1} \Delta t$ (●)

3. Intégration des équations du mouvement

Sous cette forme, la première équation (*) calcule une vitesse de demi-pas, en utilisant la force et la vitesse du pas de temps n . Ceci est suffisant pour permettre le calcul des positions des atomes au pas de temps $n + 1$, en utilisant l'équation (◇). Enfin, en utilisant les forces calculées à partir de la nouvelle position atomique x_{n+1} , la vitesse d'un demi-pas est mise à jour à la vitesse d'un pas complet v_{n+1} (●).

Méthode de Leapfrog Verlet

L'algorithme de Leapfrog Verlet [85] est une forme spéciale de l'algorithme de base de Verlet, en ce sens qu'il n'a besoin de stocker qu'un seul ensemble de positions et un seul ensemble de vitesses pour les atomes. Alors que la position x est calculée à des pas de temps entiers, la vitesse v est évaluée à des pas de temps demi-entiers :

$$v_{n+\frac{1}{2}} = v_{n-\frac{1}{2}} + \frac{f_n}{m} \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^3). \quad (\text{II.48})$$

$$x_{n+1} = x_n + v_{n+\frac{1}{2}} \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^4). \quad (\text{II.49})$$

$$v_n = \frac{1}{2} [v_{n+\frac{1}{2}} + v_{n-\frac{1}{2}}] + \mathcal{O}(\Delta t^2). \quad (\text{II.50})$$

où f est la force totale sur la particule et m est la masse de la particule.

Dans cet algorithme, les vitesses sont définies avec un demi-pas de temps en arrière ou en avant du pas de temps actuel n . Lorsque les forces f_n du pas de temps courant ont été calculées, elles sont utilisées dans la première équation (II.48) pour faire avancer les vitesses du demi-pas en arrière n au demi-pas en avant. Quand les vitesses des atomes ont été avancées, les positions peuvent être mises à jour à l'aide de la deuxième équation (II.49).

Tout au long du calcul du mouvement atomique, l'algorithme travaille avec les vitesses d'un demi-pas. Si les vitesses à pas complet sont requises, la troisième équation (II.50) peut être utilisée pour les obtenir. Cependant, il est souvent suffisant de travailler avec les vitesses d'un demi-pas.

Pour faciliter la mémorisation des étapes, les calculs effectués par l'algorithme Leapfrog Verlet sont résumés dans la figure II.8, et se lisent comme suit :

A partir des positions des particules, les forces d'interaction entre les particules sont calculées. Avec la force totale sur chaque particule et la vitesse à $(t - \Delta/2)$, nous calculons la vitesse à $(t + \Delta/2)$. Enfin, à partir de la vitesse en $(t + \Delta/2)$ et des positions en t , nous calculons les positions en $(t + \Delta)$.

À la fin, cette sous-section résume plusieurs des méthodes courantes de différences finies pour la résolution des équations du mouvement de Newton avec des fonctions

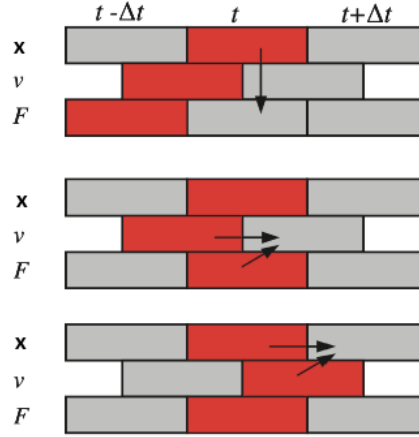


FIGURE II.8 – Représentation schématique de l'algorithme de Leapfrog Verlet.

de force continues. La variété des algorithmes actuellement utilisés prouve qu'aucune méthode n'est supérieure dans toutes les conditions rencontrées en pratique.

4 Observables et caractérisation

Les techniques décrites ci-dessus nous permettent d'effectuer des simulations par la DM. Mais nous voulons également extraire des données de nos simulations. À partir des positions, des vitesses et des interactions des particules, nous pouvons extraire les observables les plus fondamentales : L'énergie cinétique plus l'énergie potentielle $E_{tot} = E_{kin} + E_{pot}$, température T , pression P et force F . Ces observables sont calculées et enregistrées pour chaque pas de temps afin de suivre l'évolution du système pendant l'équilibrage et pour l'analyse finale. De plus, la température et la pression calculées à chaque pas de temps sont directement utilisées pour corriger la position et les vitesses des particules dans les simulations NPT. Les observables de base sont calculées comme suit [85] :

Énergie :

L'énergie totale est donnée par la somme de l'énergie potentielle et de l'énergie cinétique dans le système. L'énergie potentielle est déterminée en additionnant toutes les interactions entre les particules :

$$E_{pot} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N V(r_{ij}). \quad (\text{II.51})$$

L'énergie cinétique est calculée à partir des vitesses v_β (β est x, y ou z) de toutes les particules :

$$E_{kin} = \frac{1}{2}m \sum_{i=1}^N (v_{i,x}^2 + v_{i,y}^2 + v_{i,z}^2) \quad (\text{II.52})$$

Temperature :

Pour déterminer la température, nous utilisons l'énergie cinétique et le théorème d'équipartition :

$$T = \frac{2E_{ciné}}{k_\beta N_f}, \quad (\text{II.53})$$

où $N_f = 3N - M$ est le nombre de degrés de liberté, avec M les contraintes.

Pression :

Au lieu de se référer à un système d'axes explicite, on utilise généralement le tenseur des contraintes σ_{ij} qui décrit plus facilement cette directionnalité du chargement. Nous avons pour la force dans un solide

$$dF_i = \sum_j \sigma_{ij} dA_j, \quad (\text{II.54})$$

alors la pression est exprimée comme suit :

$$P = -\frac{1}{3} \sum_j \sigma_{ij}. \quad (\text{II.55})$$

Le signe moins est le résultat d'une contrainte généralement définie comme positive pour la tension (qui essaie d'étendre le matériau localement), tandis que la pression est généralement définie comme positive pour la compression.

Énergie cohésive :

L'énergie totale qui est calculée est considérée comme le changement d'énergie d'une collection d'atomes lorsqu'ils sont liés.

Si $E_{parfait}$ est l'énergie totale d'un matériau parfait contenant n atomes, l'énergie de cohésion par atome s'exprime comme suit [130, 131] :

$$E_{coh} = -\frac{E_{Parfait}}{n}. \quad (\text{II.56})$$

Lorsque les lacunes sont créés, il y a un changement dans le nombre d'atomes. Si $E(n, n_v)$ est l'énergie totale d'un matériau qui a des sites de réseau n avec n_v lacunes, alors l'énergie de formation des lacunes est la suivante [130, 131] :

$$E_{vac}^{Form} = E(n, n_v) - \frac{(n - n_v)}{n} E_{Parfait}. \quad (\text{II.57})$$

5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les étapes fondamentales pour réaliser une simulation par la dynamique moléculaire et qui sont employées dans ce travail. Nous avons présenté le principe du calcul dynamique, les différents types des potentiels interatomiques utilisés et les algorithmes permettant de simplifier la résolution numérique des équations du mouvement dans notre travail. Finalement, nous avons décrit les observables de base obtenues à travers nos simulations ; telles que l'énergie cohésive, la pression, etc.

Chapitre III

Structures et propriétés mécaniques des nanomatériaux bidimensionnels

Depuis la découverte de la monocouche de graphène en 2004, une attention considérable a été portée aux matériaux 2D, en particulier ceux de forme hexagonale, en raison de leur stabilité d'une part et de leurs propriétés matérielles extraordinairement différentes de celles des matériaux 3D classiques d'autre part. La recherche s'est poursuivie pour inclure les matériaux hybrides 2D du même groupe comme SiC, SnGe, GeC ou de groupes différents comme BN, InTe, SnSe, etc. La diversité de ces matériaux, ainsi que les caractéristiques distinctives de chacun d'entre eux, en ont un champ de recherche prometteur pour leur utilisation dans des applications très variées, telles que l'électronique flexible, les capteurs de contrainte, les nanogénérateurs et les systèmes nanoélectromécaniques (NEMS) innovants [132–134].

Dans ce chapitre, nous commencerons par présenter les allotropes du carbone et nous soulignerons certaines propriétés du graphène qui en ont fait le matériau révolutionnaire de ces deux dernières décennies. Ensuite, nous décrirons les structures cristallines des feuilles SiC et SiGe du groupe IV ainsi que leurs propriétés élastiques et leur éventuelle synthèse. Par la suite, nous présenterons la structure cristallographique du borophène, sa déficience en électrons, en plus de ses propriétés mécaniques intrinsèques. Nous allons aussi présenter les différentes allotropes de borophène, ainsi que sa méthode de synthèse. Nous terminerons en exposant les structures cristallines de certains composants du groupe (III-VI) ainsi que leurs paramètres élastiques.

1 Matériaux à base de carbone

Le carbone est l'une des substances les plus abondantes dans la nature. Ses atomes peuvent se lier entre eux de diverses manières, ce qui donne lieu à différents allotropes de carbone (formes structurellement différentes du même élément) en raison de sa valence. Les allotropes les plus connus sont le graphite, le diamant, la lonsdaléite, le

fullerène et le nanotube. Cela leur permet d'être utilisés dans de nombreux domaines, depuis le crayon, en passant par le corps humain, jusqu'aux nano-appareils.

1.1 Allotropes de carbone à 3 dimensions

1.1.1 Graphite

Le graphite est une forme cristalline, ou allotrope, du carbone. Sa structure est constituée de couches hexagonales d'atomes de carbone liés entre eux (*cf.* Figure III.1), maintenus ensemble par de faibles forces intermoléculaires appelées forces de Van der Waals, qui permettent aux couches de graphite d'être facilement séparées ou de glisser les unes sur les autres [137]. Dans chaque couche, les atomes de carbone sont disposés dans un réseau en nid d'abeille avec une longueur de liaison de $1.42 \text{ \AA}$, et la distance entre les plans est de $3.35 \text{ \AA}$ [135]. Les atomes dans le plan sont liés de manière covalente, avec seulement trois des quatre sites de liaison potentiels satisfaits. Le quatrième électron est libre de migrer dans le plan, ce qui rend le graphite électriquement conducteur. Dans le graphite, il s'agit d'orbitaux hybrides sp^2 et les atomes se forment en plans, chacun étant lié à trois voisins les plus proches, distants de 120 degrés [135, 136]. C'est un matériau stable et naturel que l'on trouve généralement dans les roches métamorphiques et ignées. Le graphite a de nombreuses applications industrielles, sous diverses formes naturelles ou synthétiques telles que la fabrication d'acier, la fabrication de produits polis et de peintures, la construction de panneaux solaires, la construction de batteries et la fabrication d'électrodes.

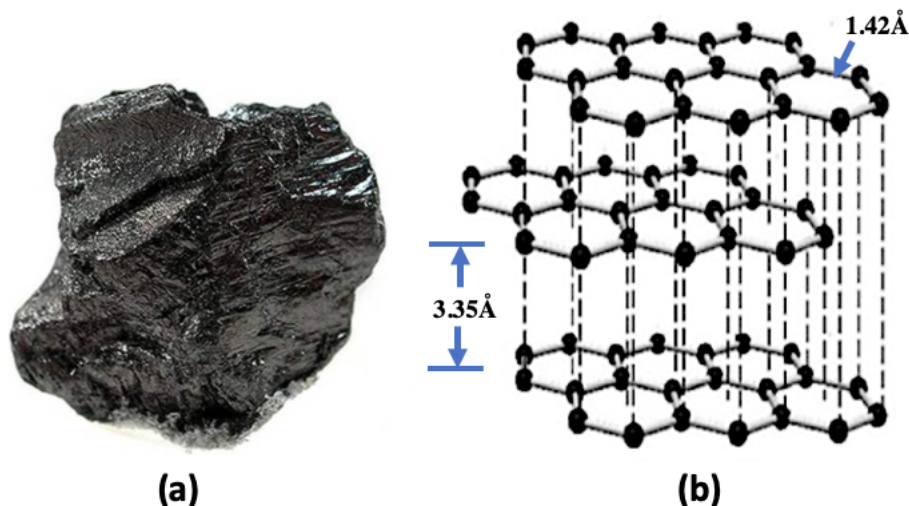


FIGURE III.1 – Diagramme schématique de (a) Graphite natif et (b) Structure du graphite.

1.1.2 Diamant

Le diamant est l'un des allotropes bien connus du carbone. Dans le diamant, la structure cristalline est cubique à faces centrées (*cf.* Figure III.2). Le paramètre de maille est de $3.58 \text{ \AA}$ et la distance interatomique est de $1.54 \text{ \AA}$, chaque atome étant lié par covalence à quatre autres carbones sous la forme d'un tétraèdre. Cette distance interatomique est proche de celle que l'on trouve dans les hydrocarbures aliphatiques, ce qui la distingue de la distance carbone-carbone plus petite de $1.42 \text{ \AA}$ que l'on trouve dans le graphite et les hydrocarbures aromatiques ($1.39 \text{ \AA}$ dans le benzène). Cette structure isotrope tridimensionnelle explique l'extrême dureté du diamant. Le graphite est très mou et glissant, tandis que le diamant est l'une des substances les plus dures connues de l'homme, et il possède une conductivité thermique très élevée. Grâce à ses propriétés, le diamant trouve de nombreuses applications dans l'industrie comme outils de coupe et d'usinage, dans les sciences comme bistouris ou enclumes à diamant et dans la joaillerie pour ses propriétés optiques [138].

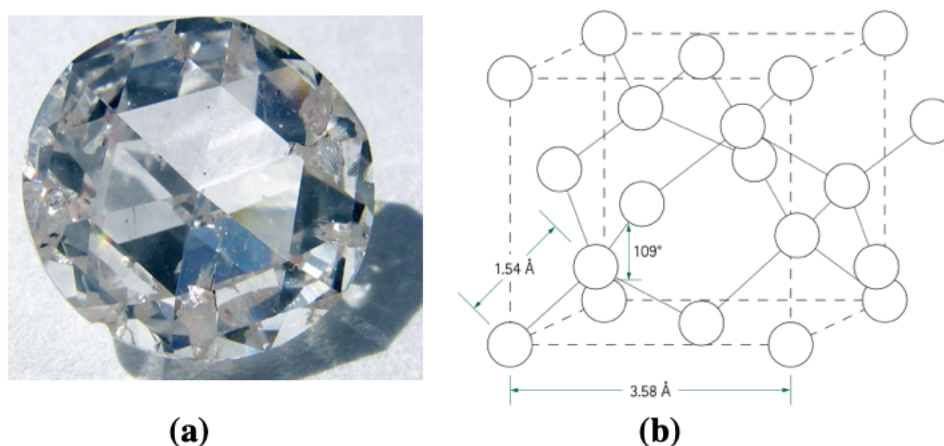


FIGURE III.2 – Diagramme schématique de (a) diamant synthétique et (b) Structure du diamant

1.1.3 Lonsdaléite

La lonsdaléite, (nommée en l'honneur de Kathleen Lonsdale (1903-1971), cristallographe anglaise), également appelée diamant hexagonal en référence à la structure cristalline, est un allotrope de carbone avec un réseau hexagonal, est l'une des trois formes naturelles de carbone cristallisé (*cf.* Figure III.3). La lonsdaléite a été identifiée pour la première fois en 1967 à partir de la météorite Canyon Diablo (lorsque des météores contenant du graphite frappent la Terre, la chaleur et le stress importants de l'impact transforment le graphite en diamant, mais conservent le réseau cristallin hexagonal du graphite.), où elle se présente sous forme de cristaux microscopiques associés

à du diamant ordinaire [139]. Il existe plusieurs méthodes de synthèse en laboratoire telles que le dépôt chimique en phase vapeur [140–142], la cellule à enclume de diamant [143], etc. La lonsdaléite présente de nombreuses propriétés mécaniques statiques excellentes, ce qui prouve qu'il s'agit d'une substance naturelle plus forte et plus rigide que le diamant [144]. Elle peut être utilisée dans plusieurs applications comme conducteurs de chaleur, enclumes, outils de coupe et forets.

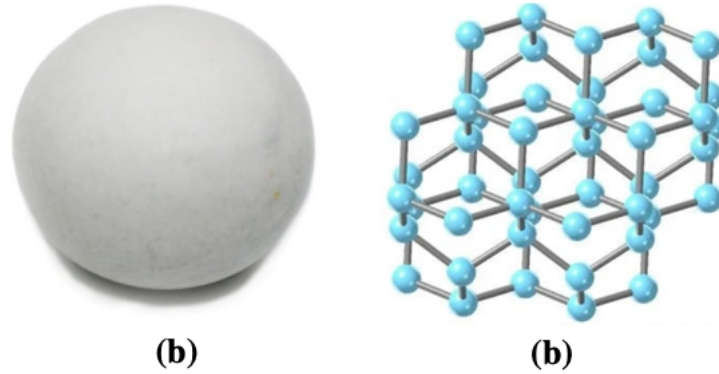


FIGURE III.3 – Diagramme schématique de (a) Diamant hexagonal lonsdaléite et (b) Structure cristalline

1.2 Graphène

Le graphène est un plan mono-atomique d'atomes de carbone qui sont arrangés dans une structure en nid d'abeille avec une constante du réseau cristallin à l'équilibre de $a = 2.46 \text{ \AA}$ et une distance interatomique entre deux carbones de $1.42 \text{ \AA}$ [15, 153] (*cf.* Figure III.4), il a été identifié en 1947, mais isolé seulement en 2004 par le Néerlandais Andre Geim et le Russo-Britannique Konstantin Novoselov, ce qui leur a valu en 2010 le prix Nobel de physique. Le graphène est parmi les plus légers découverts à ce jour, souvent qualifié de "matériau miracle".

Chaque atome de carbone est hybridé sp^2 . Ces orbitales localisées dans le plan forment les liaisons covalentes σ qui assurent la stabilité du réseau cristallin et sont à l'origine des propriétés mécaniques du graphène. La combinaison des orbitales atomiques p_z délocalisées sur l'ensemble du plan 2D forme les bandes de valence et de conduction. Le réseau hexagonal, qui n'est pas un réseau de Bravais, peut être divisé en deux sous réseaux de Bravais triangulaires A et B. La cellule primitive du graphène est donc composée de deux atomes : un provenant du sous-réseau de Bravais A et l'autre provenant du sous-réseau de Bravais B. Les vecteurs δ_i pointent les plus proches voisins d'un atome de carbone sur un sous-réseau triangulaire vers les atomes de l'autre sous réseau (*cf.* Figure. III.5-a).

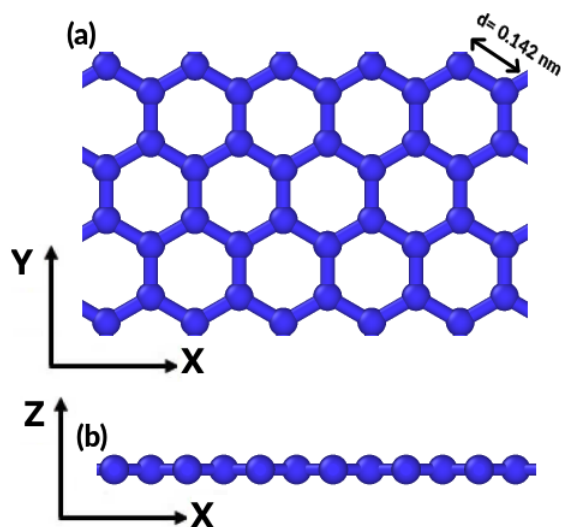


FIGURE III.4 – Structure géométrique de la graphène monocouche, (a) vue de dessus et (b) vue de section transversale

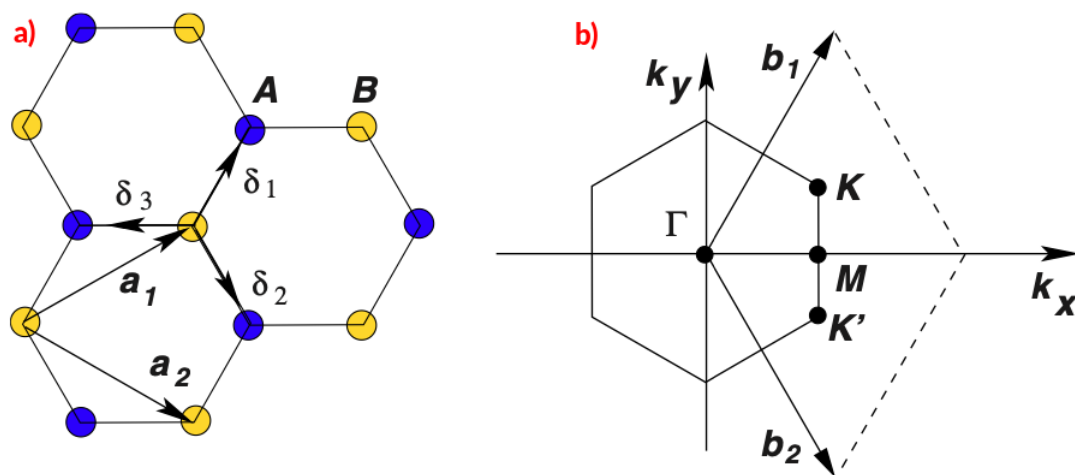


FIGURE III.5 – Maille hexagonale formée par les atomes de carbone dans le graphène monocouche. a_i désignent les vecteurs de la cellule primitive. b) Première zone de Brillouin, b_i désigne les vecteurs du réseau réciproque. Extraite de [153]

Dans un repère orthonormé (Oxy), Les vecteurs primitifs du réseau hexagonal $\vec{a}_1$ et $\vec{a}_2$ sont [153] :

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}). \quad (\text{III.1})$$

$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = \sqrt{3}a$$

Les positions des premier proches voisins sont donnés par les vecteurs suivants :

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_3 = a(-1, 0). \quad (\text{III.2})$$

Les vecteurs primitifs du réseau réciproque $\vec{b}_1$ et $\vec{b}_2$ sont donnés par :

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}\left(1, \sqrt{3}\right), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}\left(1, -\sqrt{3}\right). \quad (\text{III.3})$$

La présence de deux atomes par maille élémentaire, entraîne l'existence de deux points non équivalents K et K' appelés points de Dirac, situés aux extrémités de la zone de Brillouin. Leurs coordonnées dans l'espace réciproque sont [153] :

$$K = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right), \quad K' = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right) \quad (\text{III.4})$$

Le graphène est connu comme le matériau le plus solide découvert en raison de ses incroyables propriétés mécaniques telles que le module de Young ($\simeq 1$ TPa) et la résistance intrinsèque à la traction (130 GPa) [8, 154].

En 2014, des chercheurs de l'Université Rice et de l'Institut de technologie de Géorgie ont indiqué que malgré sa résistance, le graphène est aussi relativement fragile, avec une ténacité à la rupture d'environ $4 \text{ MPa}\sqrt{m}$ [155]. Cela indique que le graphène imparfait est susceptible de se fissurer de manière fragile comme les matériaux céramiques, par opposition à de nombreux matériaux métalliques qui ont tendance à avoir des ténacités à la rupture de l'ordre de $15\text{-}50 \text{ MPa}\sqrt{m}$.

D'autre part, concernant les propriétés mécaniques déjà détaillées dans le chapitre 1, et à partir d'analysant les courbes des contraintes en fonction des déformations armchair et zigzag présentées dans la figure. (III.6), nous déduisons que, les contraintes ultimes du graphène sont : 104.1 GPa et 122.8 GPa, respectivement. Les déformations ultimes correspondantes sont : 0.194 et 0.164 respectivement [156] . La contrainte de rupture du graphène dépend de la direction de la charge en raison de sa structure cristalline [157].

Il se révèle que le module de Young E et le coefficient de poisson ν du graphène dans les directions armchair et zigzag étaient respectivement de 1.075 TPa, 1.096 TPa et 0.172, 0.162 [156], comme indiqué dans le tableau. III.1. Cela confirme sa supériorité

mécanique.

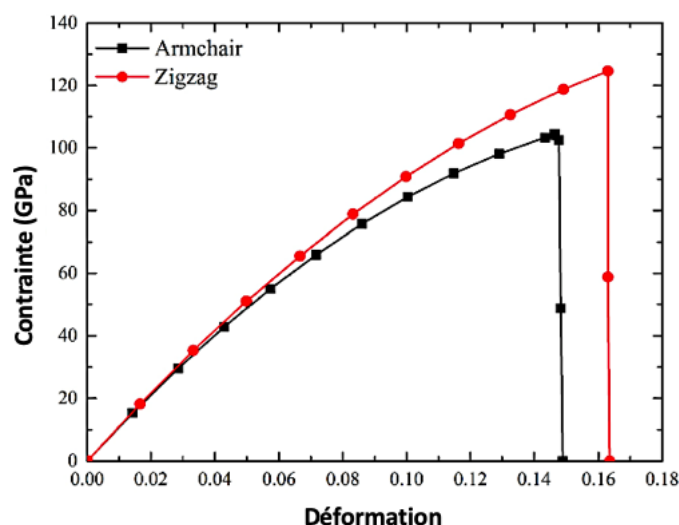


FIGURE III.6 – Courbes de contrainte-déformation du graphène sans défaut. Extraite de [156]

	Module de Young E (TPa)	Coefficient de Poisson ν	Contrainte de rupture σ (GPa)	Déformation de rupture ε (%)
Armchair (AC)	1.075	0.172	104.1	14.9
Zigzag (ZZ)	1.096	0.162	122.8	16.4

TABLEAU III.1 – Propriétés mécaniques simulées du graphène parfaite.

1.3 Dérivées de graphène à dimension 0 et 1

1.3.1 Fullerène

Le fullerène a été identifié en 1985 par Harlod Kroto, Robert Curl et Richard Smalley qui ont obtenu le prix Nobel de Chimie en 1996 pour cette découverte, est une molécule de carbone dont la forme peut être proche d'une sphère, d'un ellipsoïde, d'un tube ou d'un anneau. Il est composé d'anneaux hexagonaux (comme le graphite) mais aussi d'anneaux pentagonaux et parfois heptagonaux, qui donne la possibilité de structure fermée. C_{60} est la forme de fullerène la plus stable (*cf.* Figure III.7). Cette molécule est composée de 60 atomes de carbone formant 20 hexagones et 12 pentagones, avec un atome de carbone au sommet de chaque polygone et une liaison à chaque côté du polygone. Chaque hexagone est adjacent à 3 hexagones et à trois pentagones. Chaque pentagone est entouré par 5 hexagones. Il existe 60 liaisons simples et 30 liaisons doubles, dont la longueur est respectivement de 1.45 Å et 1.35 Å [145]. Le module d'élasticité isostatique calculé pour un seul C_{60} suggère donc qu'un cristal

de C_{60} pourrait être le matériau le plus incompressible connu, à une pression supérieure à environ 50 GPa [146]. Les fullerènes ont été largement utilisés pour plusieurs applications biomédicales, notamment la conception d'agents de contraste pour IRM haute performance, d'agents de contraste pour l'imagerie par rayons X, la thérapie photodynamique et l'administration de médicaments et de gènes [147].

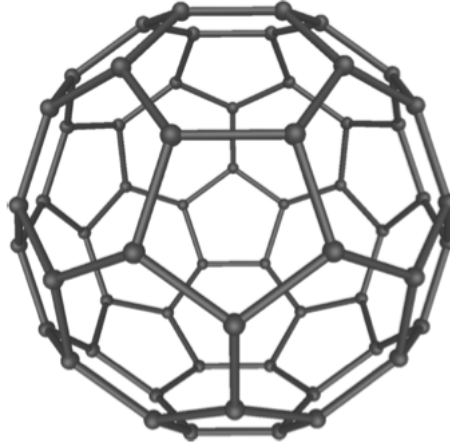


FIGURE III.7 – Structure du fullerène C_{60}

1.3.2 Nanotube de carbone

En 1991, Sumio Iijima a observé en microscopie électronique un sous-produit de la synthèse des fullerènes qui se présentait comme un dépôt noirâtre, dur et filamenteux. Ce dépôt s'est avéré être constitué de tubes creux, fermés à leurs extrémités et composés de carbone cristallisé. Ces structures particulières, de diamètre nanométrique et de longueur micrométrique, seront nommées par la suite nanotubes de carbone. Un nanotube de carbone est composé d'un ou plusieurs feuilles de graphène (i.e. plan graphitique dans lequel les atomes de carbone sont organisés selon un réseau hexagonal à l'image d'un nid d'abeilles) enroulés, suivant un rayon de courbure nanométrique, de façon à former une structure cylindrique. L'angle d'enroulement du feuille de graphène, appelé hélicité (θ), fixe la structure du nanotube. Cet angle varie de 0 à 30° compte tenu de la symétrie du réseau hexagonal et permet de classer toutes les configurations possibles en trois catégories appelées "chaise", "zigzag" et "chirale" (cf. Figure III.8).

Il existe deux types de nanotubes de carbone (NTC) :

- les nanotubes de carbone monofeuille nommés également mon-paroi ou monocouche (single-wall carbon nanotubes - SWNT) sont constitués d'un feuille de graphène enroulé sur lui-même et qui peut être fermé à ses deux extrémités par une demi-molécule de fullerène (extrémités coniques, polygonales ou sphériques)[148]

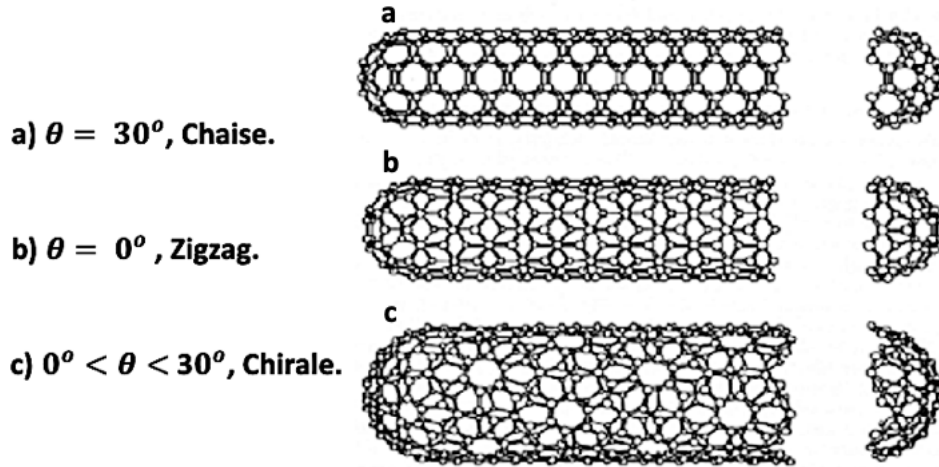


FIGURE III.8 – Structure des nanotubes de carbone : (a) chaise, (b) zigzag et (c) chiral

— les nanotubes de carbone multifeuilles également appelés multi-parois ou multicouches (multi-wall carbon nanotubes - MWNT) sont constitués de plusieurs feuilles de graphène (de 2 à 50) enroulés les uns autour des autres.

Les propriétés uniques des nanotubes de carbone résultent directement de leur filiation structurale avec le graphite, de leur forme tubulaire et de leur diamètre nanométrique. Le procédé de synthèse et la méthode de purification utilisés influent également très fortement sur les propriétés physico-chimiques des nanotubes de carbone. Les nanotubes de carbone sont les matériaux les plus solides et les plus rigides découverts en termes de résistance à la traction et de module d'élasticité. Cette résistance résulte des liaisons covalentes sp^2 formées entre les atomes de carbone individuels. Les NTC présentent un intérêt pour de nombreuses applications différentes qui nécessitent leurs propriétés, comme les batteries [149], les capteurs [149, 152] et les dispositifs médicaux [150, 151].

2 Hybrides SiC et SiGe

Les propriétés exceptionnelles du graphène l'ont rendu apte à un grand nombre d'applications et ont encouragé les chercheurs du monde entier à rechercher et à fabriquer également d'autres matériaux 2D. En conséquence, un grand nombre d'analogues du graphène dans le même groupe, tels que le silicène [158], le germanène [14], le SiC [32, 159, 160], le SiGe [26, 29, 161], etc. Ont été découverts au cours des dernières années.

Similaire au graphène, le silicène (les atomes de silicium forment une structure en nid d'abeille) possède une bande interdite nulle [15, 162]. Contrairement au graphène,

la bande interdite du silicène peut être ajustée par un champ électrique externe sans aucune modification chimique [163–165]. Le silicène a des applications potentielles dans l'électronique de spin, les dispositifs thermoélectriques, les capteurs chimiques, le stockage de l'hydrogène et les matériaux d'anode pour les batteries Li-ion [166, 167].

Le germanène fait partie des matériaux bidimensionnels (2D) émergents avec des structures en nid d'abeille, y compris le graphène, le silicène, etc. Il a une structure à faible flambement qui facilite la fonctionnalisation covalente [168, 169]. Le germanène est capable de présenter l'effet de Hall quantique de spin à des températures expérimentalement accessibles [170]. Le germanène a des applications potentielles dans les dispositifs nano et optoélectroniques [170, 171]. En outre, il a également été prévu qu'il serve de matériau d'anode dans les batteries Na et Li-ion [172]. Il est étroitement lié au silicène en termes de structure et de comportement mécanique [171–174].

En revanche, les hybrides bidimensionnels (2D) à base de Si (SiC) et (SiGe), qui sont un mélange d'atomes de carbone, de silicium ou de germanium et de silicium, présentent des propriétés mécaniques significatives qui seront expliquées ci-dessous.

2.1 Structure cristallographique

Le carbure de silicium est une monocouche hexagonale bidimensionnelle composée d'atomes de carbone (C) et silicium (Si) appartiennent au même groupe du tableau périodique, qui ont pour numéro atomique $Z=6$ et $Z=14$, respectivement. Bien qu'il soit extrêmement rare sur Terre, le carbure de silicium est particulièrement abondant dans l'espace. C'est un constituant important de la poussière interstellaire et c'est pourquoi on en retrouve souvent dans les météorites les plus primitives, c'est-à-dire les moins altérées depuis leur formation. Dans la monocouche de SiC, les atomes de carbone et de silicium se lient par des orbitales hybrides sp^2 pour former la feuille de SiC, figure. III.9. La structure hexagonale dont disposent les atomes SiC, est plane. Plusieurs groupes de recherche ont étudié la stabilité du SiC 2D plane, ils ont constaté que, bien qu'il puisse y avoir une compétition entre l'hybridation sp^2 préférée par le C dans sa forme plane et sp^3 préférée par le Si, l'état fondamental du SiC 2D est complètement plat, car le SiC 2D plane a l'énergie la plus basse [175, 176]. La constante de réseau à l'équilibre est 3.12 Å, les liaisons de type covalente liant les atomes de silicium et carbone qu'ont une distance $d = 1.8$ Å.

La monocouche hexagonale 2D de Si et de Ge a été prédite comme étant stable, et devrait être de alternative potentielle au graphène [16]. Contrairement à l'hybridation 2 du graphène, un mélange d'hybridation 2 et 3 dans les monocouches du groupe IV induit une géométrie de flambage, ce qui fait que leur bande interdite est accordée par le champ électrique externe et les déformations [29, 177, 178]. Le réseau en nid d'abeilles du SiGe est légèrement décalé par rapport au plan. La structure géométrique

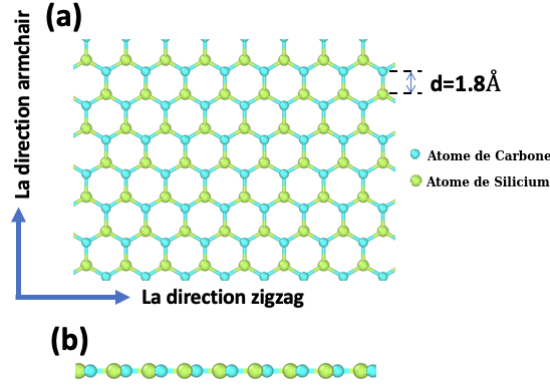


FIGURE III.9 – Schéma représentant la structure cristallographique du carbure de silicium a) vue de dessus et (b) vue de section transversale

du SiGe est représentée dans la figure. III.10. La constante de réseau à l'équilibre est 4.1 Å et la longueur de la liaison Si-Ge est 2.43 Å . Contrairement au graphène qui est complètement planaire, l'écart de hauteur entre deux atomes adjacents est 0.58 Å et apparaît le long de la direction zigzag.

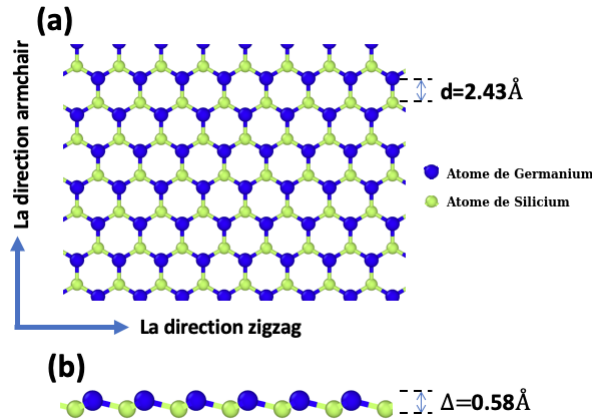


FIGURE III.10 – Structure géométrique de la feuille du silicium-germanium a) vue de dessus et (b) vue de section transversale

2.2 Module élastique

Les propriétés mécaniques de tout matériau sont déterminées par sa liaison atomique dans le plan et hors du plan. Le carbure de silicium est l'un des matériaux connus les plus solides car il lie le silicium et le carbone par des liaisons covalentes fortes. Comme le carbure de silicium 3D, le carbure de silicium 2D est un matériau fragile et une chute soudaine de la contrainte à une déformation élevée a été prédite [30, 31]. Cependant, contrairement au SiC 3D qui est un matériau lié de manière covalente à la fois le long de l'axe c et de l'axe a , le carbure de silicium monocouche est un

matériau d'une épaisseur d'un atome, sans axe *c*. En tant que tel, le SiC 2D devrait avoir des propriétés mécaniques différentes de celles du SiC 3D.

Des études théoriques ont indiqué que le SiC 2D possède des propriétés mécaniques anisotropes [30–32, 179, 180]. Les propriétés mécaniques du SiC 2D, telles que le module de Young, la contrainte et la déformation ultimes, et la rigidité dans le plan, sont fortement affectées par la structure des bords (armchair ou zigzag) et leurs orientations. En termes de propriétés de traction, le module de Young du SiC 2D est d'environ 180 N/m dans la direction zigzag, et 175 N/m dans la direction armchair. Cette valeur est presque 53% de celle du graphène, qui est de 358 N/m. La contrainte de traction à la rupture du SiC 2D est également d'environ 21 N/m dans la direction zigzag, soit presque la moitié de celle du graphène. La déformation rapportée à la contrainte maximale est de 23.2%, ce qui est supérieur à celle du graphène (20.3%) [30, 31, 179].

Le SiC 2D peut supporter une contrainte de compression maximale de 85 N/m, ce qui est beaucoup plus important que sa rupture par traction. Cette différence est due à la nature anisotrope de ses propriétés mécaniques. Le SiC 2D devrait avoir un coefficient de Poisson de 0.29 à 0.32 [15, 179, 181]. Le SiC 2D peut être considéré comme un matériau résistant et rigide. Il a des valeurs de ténacité et de rigidité d'environ 3.8 GPa et 166 J/m^2 respectivement. Le graphène n'est qu'environ 13.63 % plus résistant que le SiC 2D. De plus, par rapport à de nombreux autres matériaux semi-conducteurs 2D tels que le silicene, l'AIN et le GaN, le SiC 2D est un matériau beaucoup plus rigide [15, 179].

Les effets des contraintes uniaxiales et biaxiales, 20-140 N/m, sur le comportement mécanique du SiC 2D ont également été étudiés, et le SiC 2D a démontré une bonne intégrité structurelle et une stabilité mécanique sous contrainte uniaxiale et biaxiale [179].

Les propriétés mécaniques du SiC 2D peuvent varier considérablement en fonction de la contrainte uniaxiale, de la température, des défauts de lacunes, de la concentration de lacunes, de la vitesse de déformation, etc. [30, 180, 182, 183]. Par exemple, une dégradation mécanique considérable est attendue à la suite de défauts. Non seulement la concentration du défaut mais aussi sa nature ont des impacts différents sur les propriétés mécaniques de ces matériaux. Par exemple, certaines études ont rapporté que la lacune d'un seul atome peut dégrader les propriétés mécaniques du SiC 2D encore plus que les défauts de bi-lacune [30, 182, 183].

La feuille bidimensionnelle en nid d'abeille SiGe est un autre composé binaire du groupe IV présentant des propriétés élastiques intéressantes. À température ambiante (300K), des résistances à la traction maximales de ~ 94.83 et ~ 91.92 GPa dans les orientations armchair et zigzag, respectivement, ont été obtenues [184]. D'autre part, les déformations critiques à la rupture ont été enregistrées comme ~ 0.3127 et ~ 0.3604

pour les orientations armchair et zigzag, respectivement [184]. Ces comportements mécaniques anisotropes considérables le long des deux orientations différentes sont très similaires à d'autres systèmes 2D [185, 186]. De plus, le module de Young et le coefficient de Poisson se sont révélés respectivement ~ 58 GPa et ~ 0.32 , ceux qui montrent une faible dépendance à la direction zigzag et armchair [15, 26].

L'effet de la bicouche SiGe a été clairement signalé. Les calculs d'énergie totale révèlent que la bicouche empilée en AB est relativement plus stable que la bicouche empilée en AA, avec une différence d'énergie d'environ $\sim 0,07$ eV/atome. Par conséquent, la résistance maximale à la traction estimée de la bicouche est légèrement supérieure à celle de la monocouche, tandis que l'inverse est vrai pour la déformation à la traction calculée [29].

En ce qui concerne les défauts, l'énergie de formation du défaut de vacance ponctuelle (PV) (Si ou Ge) est inférieure à celle du défaut de bi-vacance (BV). Par conséquent, les probabilités de former un défaut PV sont plus élevées que celles d'un défaut BV dans la structure 2D-SiGe [184]. De plus, la vacance de point montre la plus grande diminution de la résistance à la rupture, du module élastique et de la contrainte de rupture par rapport aux défauts de double vacance pour les orientations armchair et zigzag [184].

2.3 Synthèse de SiC

Contrairement au graphène qui peut être exfolié du graphite 3D par exfoliation mécanique, la synthèse de SiC monocouche est l'une des synthèses les plus difficiles et délicates parmi les matériaux 2D, exigeant une compréhension approfondie de la structure atomique du SiC 3D et de ses structures cristallines. Le principal défi est que le SiC 3D n'est pas un matériau de van der Waals en couches. C'est un matériau à liaison covalente avec une liaison sp^3 entre le carbone et le silicium le long de l'axe c. En tant que tel, la formation d'un carbure de silicium monocouche nécessite une transformation de phase de sp^3 à sp^2 . De plus, le carbure de silicium 3D existe dans plus de 250 polytypes [187], ce qui complique encore le processus de synthèse et rend la sélection du polytype de précurseur de carbure de silicium extrêmement importante. Compte tenu de tous ces défis, des approches descendantes (*top-down*) et ascendantes (*bottom-up*) ont été utilisées pour développer des nanofeuilles de SiC. Ces approches sont expliquées sur la base du diagramme schématique suivant III.11. En général, l'approche "*bottom-up*" consiste à synthétiser des nanoparticules au moyen de réactions chimiques entre les atomes/ions/molécules (figure III.11b). L'approche "*top-down*", quant à elle, fait appel à des méthodes mécaniques pour écraser ou briser le matériau 3D en plusieurs parties afin de former des nanoparticules (figure III.11a). Certains exemples de méthodes de

synthèse "*top-down*" sont l'exfoliation mécanique, l'exfoliation liquide, les gravures chimiques ou une combinaison des deux, par exemple la gravure par oxydation thermique et l'exfoliation liquide. Cette méthode a été largement utilisée pour la synthèse du graphène, de l'oxyde de graphène, du nitrure de bore, des MXènes, des dichalcogénures de métaux de transition (TDMs), et d'autres matériaux 2D en couches [189–192]. Dans l'approche d'exfoliation liquide, il a été constaté que la taille et l'épaisseur du SiC sont profondément affectées par la vitesse de centrifugation et le temps d'exfoliation. Bien que la fabrication de nanofeuilles plus fines nécessite un temps d'exfoliation et une centrifugation plus longs, cette dernière compromet la taille des nanofeuilles. Ainsi, pour qu'une approche "*top-down*" réussisse ici, elle doit être conçue intelligemment. Le potentiel de l'approche "*bottom-up*" et plus précisément de la méthode CVD a également été exploré [193–196].

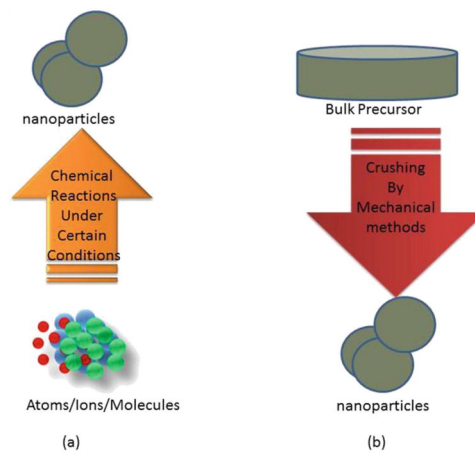


FIGURE III.11 – Approches de synthèse pour les nanoparticules (a) approches "*bottom-up*" et (b) approches "*top-down*" [188].

Des nanofeuilles de carbure de silicium ont été produites par exfoliation humide de SiC hexagonal 3D dans des solvants d'alcool isopropylique (IPA) ou de N-méthyl-2-pyrrolidone (NMP), figure. III.12. Le processus d'exfoliation se compose de deux étapes : (i) exfoliation humide du précurseur de SiC par sonication en bain et (ii) centrifugation. Tout au long du processus de sonication, la température du bain a été maintenue en dessous de 50 C. Une fois l'étape de centrifugation terminée, les échantillons ont été transférés sur des substrats SiO₂/Si ou autres pour diverses caractérisations.

3 Borophène hexagonale à 2 dimension

De nombreux efforts ont été déployés pour découvrir des matériaux 2D stables avec un comportement métallique au lieu du graphène qui est encore un semi-métal (ou un semi-conducteur sans gap). Par conséquent, la première synthèse de borophène

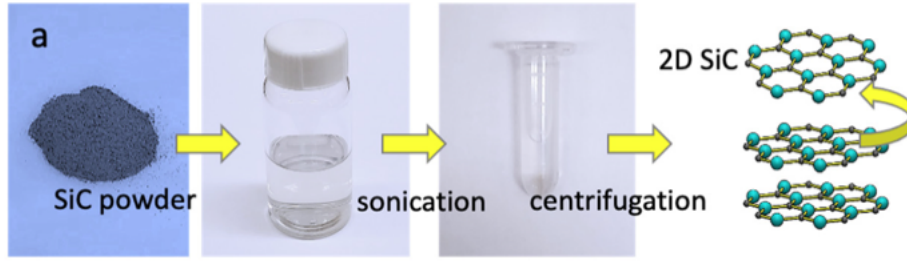


FIGURE III.12 – Photographies du processus d'exfoliation de SiC [197].

(feuille de bore 2D) en 2015 [33] a été la récolte de ces efforts. Le bore présente de nombreux allotropes 2D et divers polymorphes structuraux contenant principalement des réseaux hexagonaux et triangulaires [198–201]. Au meilleur de notre connaissance, quatre phases ($2\text{-}Pmmn$, β_{12} , χ_3 et borophène de type graphène) de borophène ont été synthétisées sur des substrats d'Ag ou d'Al(111) dans des conditions d'ultravide [33, 206, 207], comme le montre la figure III.13. Avant la synthèse expérimentale, les quatre structures ont été prédites par des calculs théoriques, ce qui montre la puissance des calculs théoriques. Le borophène est un candidat prometteur pour de nombreuses applications dans le domaine de l'énergie, comme les batteries à ions métalliques [202, 203] et le stockage de l'hydrogène [204, 205].

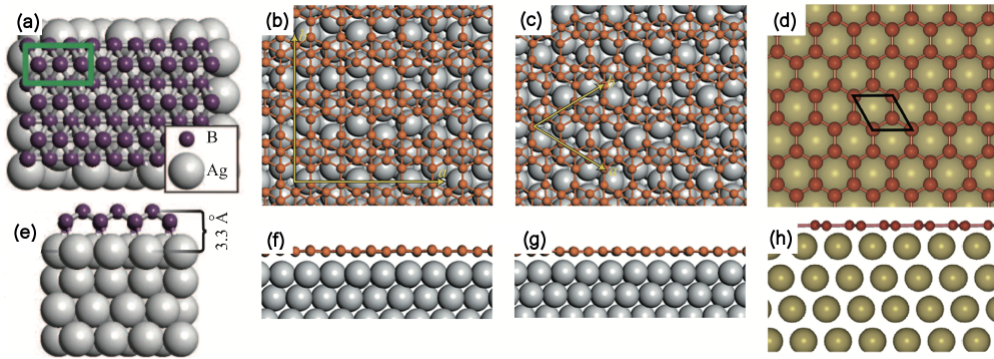


FIGURE III.13 – Modèles de structure en vue de dessus (a-d) et de côté (e-h) de $2\text{-}Pmmn$, β_{12} , χ_3 et borophène de type graphène sur le substrat Ag/Al(111) [33, 206, 207].

3.1 Propriétés structurales

L'atome de bore a cinq électrons avec une configuration électronique $1s^2 2s^2 2p^1$, ce qui signifie que le nombre d'électrons de valence est inférieur aux orbitales disponibles. En raison du petit rayon atomique, l'élimination des électrons de valence du bore nécessite une grande quantité d'énergie. Par conséquent, le bore forme probablement des composés covalents plutôt que des ions B^{3+} . La matière veut toujours être

sous la forme la plus stable. Pour la plupart des atomes non métalliques, la stabilité est obtenue en suivant la règle de l'octet. Théoriquement, le bore peut accueillir cinq électrons supplémentaires selon la règle de l'octet, mais le bore émerge généralement trois liaisons, comme BH_3 , avec un total de six électrons dans la coque la plus externe, à l'exception des composés de coordination avec quatre ligands comme $[BF_4]^-$ et $B[OH]_4^-$. Par conséquent, la liaison 2c-2e conventionnelle ne tient pas dans les composés de bore "déficients en électrons" [208–210]. Par la suite, de nombreux chercheurs ont découvert que les liaisons localisées à trois centres, les liaisons multicentriques et les liaisons σ et π délocalisées jouent un rôle crucial dans la stabilisation des composés du bore [211, 212]. Cette configuration électronique particulière entraîne également de nombreuses propriétés anormales dans les composés du bore [208, 213, 214].

Les calculs de premiers principes suivants ont prédit que le borophène $2-Pmmn$ possède des propriétés mécaniques remarquables [215, 216], qui peuvent rivaliser avec le graphène [33], qui sera étudié dans cette thèse.

Le borophène est structurellement similaire au graphène avec un atome de bore supplémentaire au centre de l'hexagone. La structure hexagonale dont disposent les atomes B, est ondulée (ou "plissée") le long de la direction zigzag (*cf.* Figure. III.14). Les constantes de réseau sont respectivement $a = 1.613 \text{ \AA}$ et $b = 2.864 \text{ \AA}$, et l'écart de hauteur entre deux atomes adjacents Δ est $0.911 \text{ \AA}$. Les distances interatomiques entre les premiers plus proches voisins sont de $1.613 \text{ \AA}$ pour la liaison longue (qui relie les atomes du haut et du bas de la feuille de borophène) et $1.879 \text{ \AA}$ pour la liaison courte (liant deux atomes sur la même couche) [34, 217, 218].

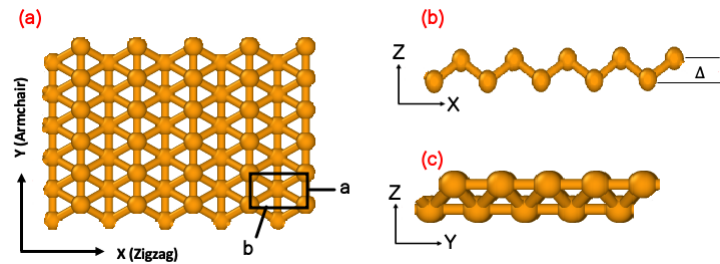


FIGURE III.14 – Une vue (a) de haut et (b), (c) de profil de la structure cristallographique plissée correspondant au $2-Pmmn$ borophène.

3.2 Propriétés mécaniques

Un intérêt considérable est porté sur les propriétés mécaniques des borophènes [34, 219–224]. En raison des fortes liaisons B-B et de la structure atomique unique, un module mécanique ultraélevé du borophène a été rapporté. La phase $2-Pmmn$ du borophène présente des propriétés mécaniques hautement anisotropes et un coefficient

3. Borophène hexagonale à 2 dimension

de Poisson négatif. Le module de Young dans la direction armchair est de 398 N/m [215], également supérieur à celui du graphène. Le module de Young le long de la direction zigzag (170 N/m) est beaucoup plus petit. En raison de la structure ondulée, les coefficients de Poisson dans le plan (-0.04 dans la direction armchair et -0.02 dans la direction zigzag) sont négatifs. Les déformations ultimes de la phase 2- $Pmmn$ du borophène le long des directions zigzag et armchair sont respectivement de 0.15 et 0.10. Les contraintes correspondantes sont respectivement de 12.95 et 27.46 N/m [225]. Lorsque la déformation le long de la direction zigzag est de 0.1, la contrainte correspondante n'est que d'environ 11.1 N/m, ce qui est beaucoup plus faible que celle sous la même valeur de déformation le long de la direction armchair. En raison de la compensation de l'angle dièdre et des angles de liaison B-B le long de la direction zigzag, il est plus facile d'appliquer une contrainte le long de la direction zigzag. Le long de la direction biaxiale, la déformation ultime est de 0.13 et la contrainte correspondante est d'environ 23 N/m.

Les propriétés mécaniques du borophène sont affectées par le défaut de lacune du borophène, le nombre de couches et la température. Chacun de ces aspects sera traité dans ce qui suit. La principale différence entre le borophène 2- $Pmmn$ et les deux autres structures (β_{12} et χ_3) est l'absence de lacunes, ce qui entraîne une baisse de l'énergie de cohésion, comme le montre le tableau. III.2

	a (Å)	b (Å)	h (Å)	E_c (eV/atom)
Borophène 2- $Pmmn$	1.613	2.864	0.911	-6.099
Borophène χ_3	4.45	4.45	0	-6.159
Borophène β_{12}	5.07	2.93	0	-6.147

TABLEAU III.2 – Constantes de réseau a et b, écart de hauteur h, énergie cohésive E_c calculées pour trois structures de borophène [226].

Premièrement, les effets du défaut de lacune de bore sur les propriétés mécaniques ont été rapportés pour la première fois par Mortazavi et al. [222]. Leurs résultats montrent que le module de Young le long de la direction armchair diminue presque linéairement avec l'augmentation de la concentration de défauts. Pour β_{12} et χ_3 , le module de Young le long de la direction armchair est de 179.00 et 198.50 N/m, respectivement, ce qui est beaucoup plus petit que celui de la phase parfaite 2- $Pmmn$ du borophène (398 N/m). Cependant, le long de la direction zigzag, l'effet de la concentration des lacunes de bore sur le module de Young est relativement faible. Il est intéressant de noter que, contrairement au coefficient de Poisson négatif de la phase 2- $Pmmn$ sans défaut du borophène, les coefficients de Poisson des β_{12} et χ_3 sont positifs. En analysant la structure cristalline, nous pouvons attribuer le coefficient de Poisson négatif de la phase 2- $Pmmn$ du borophène à sa structure ondulée. Cependant, toutes

les déformations critiques pour les feuilles β_{12} et χ_3 le long des deux directions dans le plan sont plus grandes que celle de la phase 2- $Pmmn$ sans défaut du borophène.

Le nombre de couches dans la phase 2- $Pmmn$ multicouche du borophène a également un effet important sur ses propriétés mécaniques. D'une couche à quatre couches, le module de Young de la phase 2- $Pmmn$ du borophène dans le sens de l'armchair est respectivement de 397, 380, 360 et 338 N/m. Dans le sens zigzag, le module de Young correspondant est respectivement de 158, 144, 141 et 136 N/m [35]. Les modules de Young le long des deux directions dans le plan diminuent avec l'augmentation du nombre de couches. Un phénomène similaire a été observé dans le phosphorène noir [227].

Le module de Young du borophène diminue avec la température [104, 224]. Pour le borophène avec une concentration en bore η de 4/27, le module de Young le long de la direction zigzag est de 180 N/m à 1K, qui est réduit à 87 N/m à 600 K. Nous mentionnons que η , la "densité de trous hexagonaux" est définie comme suit :

$$\eta = \frac{\text{Nombre de trous hexagonaux}}{\text{Nombre d'atomes dans la feuille triangulaire d'origine}}. \quad (\text{III.5})$$

Nous révélons en outre que les propriétés de rupture du borophène sont très sensibles à la température. Lorsque la température de chargement augmente de 10 à 700 K, la résistance à la rupture et la déformation à la rupture diminuent de $\sim 50\%$ et $\sim 60\%$, respectivement [38].

3.3 Synthèse du borophène

La structure cristalline principale du bore 3D (Figure. III.15) est basée sur un icosaèdre B_{12} comme unité structurale de base, les différents types de cristaux de bore étant formés par différentes connexions et méthodes de liaison sur l'icosaèdre B_{12} [228]. Par conséquent, le bloc de bore n'est pas une structure en couches comme le graphène, ce qui rend la préparation du borophène complexe et difficile. Comme nous le savons tous, un grand défi de fabrication du borophène existe toujours en raison des configurations de liaison dans le bore 3D. Théoriquement, un réseau triangulaire sera plus stable s'il comporte des trous périodiques [229, 230] et peut croître sur des substrats métalliques, tels que Ag(111) [231], Au(111) [232] et Cu(111) [233]. En raison de la passivation du métal à partir de la stabilisation de l'hybridation sp^2 et de l'Al avec la stratégie de stabilisation consistant à transférer une charge électronique de Al à l'atome de bore [206, 234].

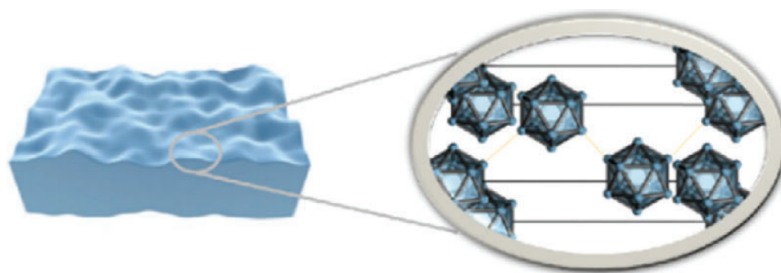


FIGURE III.15 – Structure du bore 3D, dont les unités structurales sont combinées par des liaisons complexes.

Les techniques “Bottom-up” et “top-down” sont deux méthodes principales pour la préparation de nanomatériaux 2D. L’approche “bottom-up” comprend le dépôt physique en phase vapeur (PVD), [235] le dépôt chimique en phase vapeur (CVD), [236, 237] et les méthodes de synthèse chimique par voie humide, [238, 239] entre autres (Figure. III.16-a). Le CVD implique la formation d’un film sur un substrat par l’intermédiaire de précurseurs en phase gazeuse associés réagissant dessus. L’environnement, les substrats et les précurseurs sont trois facteurs cruciaux affectant les propriétés et la croissance des produits dans cette méthode. Les oxydes métalliques, le graphène et le h-BN ont tous été synthétisés par CVD. Au cours du processus de PVD, la source de matériau est vaporisée à l’état gazeux par une méthode physique dans des conditions de vide et déposée sur un substrat pour former un film fonctionnel. Les nanofeuilles 2D de matériaux monocouche sont souvent préparées par des réactions chimiques en solution, appelées synthèse chimique par voie humide. De nombreux matériaux, tels que CuS , Co_3O_4 , $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, WO_3 ont été préparés par cette méthode à haut rendement et à faible coût. En général, les approches “bottom-up” peuvent être utilisées pour la synthèse de presque tous les types de nanomatériaux 2D. Les approches “top-down” comprennent le clivage mécanique, [187, 241] l’ultrasonication, [242] l’exfoliation par intercalation d’ions, [243, 244] et la gravure [245, 246] (Figure. III.16-b). Le clivage mécanique repose sur les forces de cisaillement pour surmonter les forces de van der Waals entre les couches et est largement utilisé dans l’exfoliation de matériaux 2D à partir de matériaux 3D [241, 247] Il convient de noter que la première synthèse réussie de graphène a été réalisée par cette méthode [248]. L’ultrasonication induit une exfoliation liquide en fonction des forces de cisaillement ; son énergie acoustique peut délaminer les matériaux en couches tels que le graphite et le MoS_2 . Dans cette méthode, la taille, la qualité et la dispersion des matériaux 2D peuvent être contrôlées par le solvant et le temps de sonication. Les avantages de l’ultrasonication sont le faible coût et la grande échelle de production, mais le rendement du matériau 2D monocouche est faible. Pendant l’intercalation ionique-exfoliation, les ions s’intercalent dans l’espacement des couches pour

réduire les forces de van der Waals entre les couches, induisant l'exfoliation. Les matériaux en couches, y compris les dichalcogénures de métaux de transition (TMD) et le graphite, peuvent être facilement exfoliés par cette méthode. Les approches “top-down” mentionnées ci-dessus conviennent principalement aux solides de van der Waals, tandis que les méthodes de gravure telles que la gravure à l'acide et la gravure par oxydation thermique sont couramment utilisées pour les solides qui ne sont pas de van der Waals. La gravure sélective et l'exfoliation sont utilisées pour préparer des matériaux 2D avec une forte liaison entre les couches dans leurs matériaux 3D, qui ne peuvent pas être obtenus par simple exfoliation mécanique. Le matériau 2D MXène peut être obtenu par gravure sélective des couches A de MAX (précurseur du MXène, les phases MAX. Cette famille compte plus de 70 composés, de composition chimique $Mn+1AX_n$ ($n = 1 \text{ à } 3$) avec M = métal de transition, A = élément du groupe 13 ou 14, et $X = C$ et/ou N). Lors du processus de gravure par oxydation thermique, le matériau s'oxyde rapidement à haute température et forme des oxydes à la surface, qui sont instables dans l'air ou l'eau. Par conséquent, les substances à la surface du matériau peuvent être éliminées par oxydation et des nanofeuilles peuvent être obtenues par oxydation et exfoliation multiples. Le borophène et le g-C₃N₄ ont été préparés avec succès par cette méthode.

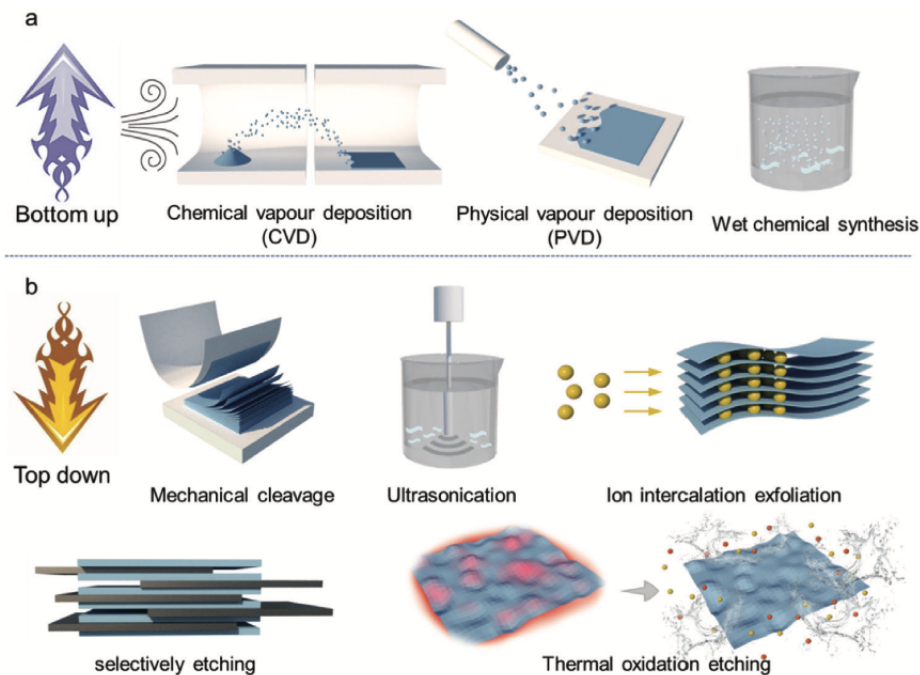


FIGURE III.16 – La principale méthode de synthèse des nanofeuilles 2D. a) Méthode “Bottom-up” : CVD, PVD, et chimie humide. b) Méthode “top-down” : clivage mécanique, ultra sonication, exfoliation par intercalation d’ions, gravure sélective et gravure par oxydation thermique [240].

3.3.1 Synthèse sur Ag(111)

Comme nous l'avons mentionné plus haut, il existe d'autres substrats de synthèse que l'Ag(111), tels que Cu(111) et Au(111). Nous nous intéressons dans cette thèse à la structure ondulée du borophène ($2-Pmmn$) et nous avons donc choisi de discuter de la méthode correspondante.

En 2015, Guisinger et al. [33] ont réussi à synthétiser du borophène en couche monoatomique ultrafine sur l'argent propre à des températures comprises entre 723 et 973 K, dans des conditions d'ultravide en utilisant de la vapeur de bore (pureté de 99.9999 %, le flux de bore est contrôlé à 0.01 à 0.1 monocouche par minute [ML min^{-1}]) comme source de bore (Figure III.17a, b). La source très pure d'atomes de bore a permis d'éviter l'utilisation de précurseurs toxiques (par exemple, le diborane) et le substrat d'argent propre a fourni une bonne surface inerte pour la croissance du borophène. Cette méthode a conduit à la formation de deux phases de borophène : une phase homogène et une phase plus ondulée se sont formées sur l'argent à 820 K (Figure III.17c, d). Il a été démontré que la température et le taux de dépôt affectent les concentrations relatives des deux phases, dans lesquelles de faibles taux de dépôt favorisent la génération d'une phase ondulée tandis que des taux de dépôt plus élevés favorisent la génération d'îlots homogènes (Figure III.17c, h).

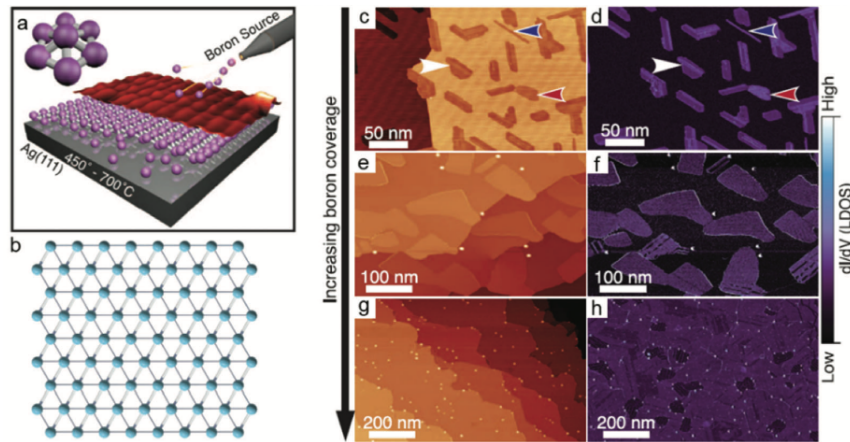


FIGURE III.17 – Synthèse et caractérisation du borophène a) Schéma de la synthèse du borophène sur l'argent. b) Structure du borophène prédite par ordinateur. c-h) Images dI/dV en boucle fermée du borophène à droite et topographie STM à grande échelle du borophène à gauche, montrant une couverture faible (c,d), moyenne (e,f) et élevée (g,h). Les marques bleues, rouges et blanches indiquent respectivement les nanorubans à phase ondulée, les îles à phase ondulée et la phase homogène [33].

3.3.2 Synthèse par exfoliation en phase liquide

Teo et al. [37] ont prouvé qu'un borophène multicouche de qualité supérieure avec une taille et une épaisseur contrôlées peut être synthétisé par exfoliation en phase liquide assistée par ultrasons. Au cours du processus de synthèse, la poudre de bore a été dispersée dans un solvant diméthylformamide (DMF)/alcool isopropylique (IPA) (1 mg mL^{-1}) et soumise à la sonication de 350 W pendant 4 h. Du borophène d'épaisseurs différentes a été recueilli en ajustant la vitesse de centrifugation (Figure III.18a). Par la suite, le borophène obtenu a été caractérisé par AFM (Figure III.18b, e). Le borophène ondulé dans le DMF avait une épaisseur moyenne de 1.8 nm et une surface de $19\,827 \text{ nm}^2$ (Figure III.18c, d), tandis que le borophène décollé dans l'IPA avait une épaisseur de 4.7 nm et une surface de 1791 nm^2 (Figure III.18f, g); ainsi, la taille et l'épaisseur du borophène peuvent être contrôlées en ajustant le solvant utilisé dans l'exfoliation ultrasonique.

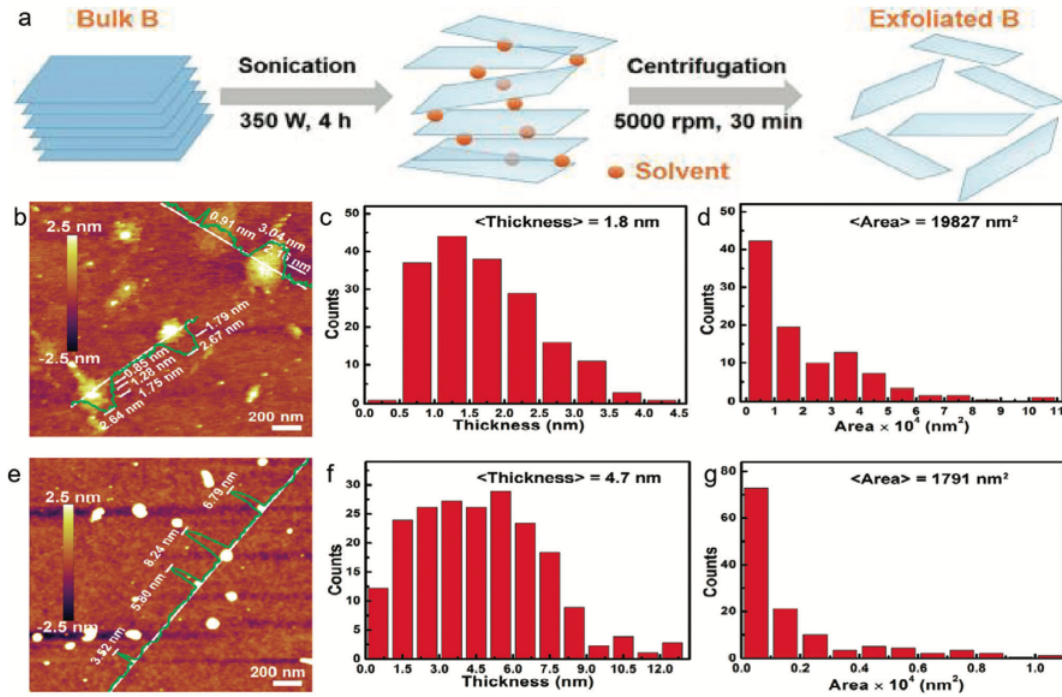


FIGURE III.18 – a) Schéma de la synthèse des exfoliations en phase liquide assistée par sonication de borophènes de haute qualité. b-g) Caractérisation AFM du borophène synthétisé dans le DMF (b-d) et l'IPA (e-g) par sonication. b,e) Images topographiques AFM et profils d'altitude. c,f,d,g) Épaisseur et taille du borophène préparé. [37] .

4 Matériaux hybrides à base des groupes III-VI

Contrairement au graphène sans gap, de nombreux matériaux semi-conducteurs 2D ont été découverts jusqu'à présent, tels que le groupe des dichalcogénures de métaux de transition (TMD), le phosphore noir (BP) ultrafin, le silicène, qui pourraient idéalement remédier à l'inconvénient de la bande interdite du graphène [249–253].

À l'instar des TMD, les matériaux en couches III-VI constituent un autre groupe important de semi-conducteurs 2D, qui a connu un regain d'intérêt pour les applications optoélectroniques ces dernières années grâce à leurs bandes interdites accordables, leur absorption efficace de la lumière et leur grande mobilité des porteurs [254, 255]. En général, sur la base de différentes stoechiométries, les matériaux III-VI en couches peuvent être divisés en deux sous-groupes principaux, qui sont MX (par exemple, GaSe[256], GaTe[257], InSe[258], etc.), et M_aX_b (par exemple, In_2Se_3 [259], In_2S_3 [260], In_3Se_4 [261], etc.), présentant une structure cristalline et électronique différente. Contrairement au MoS_2 , les semi-conducteurs en couches III-VI présentent généralement un certain nombre de polymorphes distincts, tels que α -, β - et γ - InSe, ce qui fait que le groupe couvre un large éventail de caractéristiques [262].

4.1 Structures et réseaux

Les applications cibles des matériaux sont principalement dominées par leur structure cristalline et leurs propriétés physiques. Par conséquent, il est essentiel d'introduire d'abord la géométrie des semi-conducteurs 2D III-VI ainsi que leurs propriétés mécaniques pour mieux comprendre leur potentiel dans les dispositifs thermo-mécaniques. En général, la structure cristalline du semi-conducteur monocouche III-VI est constituée de deux couches empilées verticalement de métaux du groupe III prises en sandwich entre deux couches de chalcogénures, qui sont reliées par des forces de van der Waals (vdWs). Les variations dans la séquence des empilements se traduisent par différents polytypes de matériaux III-VI. Dans cette section, les propriétés structurales et mécaniques du groupe III-VI seront démontrées en analysant 2D InSe et GaSe, qui sont deux membres représentatifs de ce groupe.

La structure optimisée de la monocouche MX est présentée dans les Figures III.19(a), III.19(b) et III.19 (c), le cristal présente une structure en nid d'abeille, où deux couches M de liaison sont prises en sandwich entre deux couches X, empilées dans la séquence X-M-M-X. Les paramètres géométriques optimisés, par ex. la constante de réseau, la longueur des liaisons et l'épaisseur entre les couches X supérieure et inférieure sont présentées dans le tableau III.3 avec d'autres matériaux appartient à la famille III-VI.

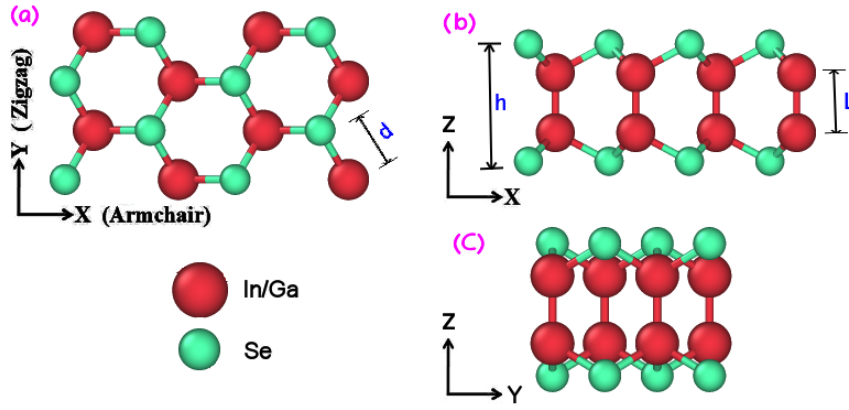


FIGURE III.19 – Vues de dessus (a) et de côté [(b) et (c)] de la structure de la monocouche MX (GaSe et InSe).

	a (Å)	d (Å)	L (Å)	h (Å)
InSe [47]	4.10	2.69	2.81	5.36
GaSe [263]	3.82	2.5	2.47	4.83
BO [264]	2.44	1.52	1.77	2.92
InTe [109]	4.40	2.89	2.81	5.86

TABLEAU III.3 – Constante de réseau calculée (a), longueur de liaison de M-X (d), M-M (L), et épaisseur entre les couches X supérieure et inférieure (h) de la structure de monocouche MX (InSe, GaSe, BO, et InTe)

4.2 Réponse élastique

Le sélénure d'indium (InSe) présente des propriétés mécaniques intéressantes, grâce à sa géométrie inhabituelle qui se développe en structure "bicouche", comme l'indiquent les données expérimentales, ce qui est différent des autres matériaux 2D tels que le graphène, le borophène, le MoS_2 , etc. La figure (III.20) représente les courbes de contrainte-déformation de la monocouche d'InSe sous tension uniaxiale dans les directions x (armchair) et y (zigzag) à 1 K et 300 K. Le module de Young (Y_s , obtenu par la première dérivée de la courbe contrainte-déformation avec une déformation de 0 à 0.03) dans les directions armchair et zigzag est respectivement de 45.7, 44.8 N/m, respectivement [47], ce qui est considéré comme inférieur à celui de graphène (335 N/m) [8] et du MoS_2 (139.5 N/m) [265]. Ce résultat indique le caractère isotrope des comportements mécaniques de la monocouche d'InSe dans le régime élastique, en fonction de sa structure cristalline. A 1K, la contrainte de rupture est de 12 N/m et 9.8 N/m, respectivement, pour les directions zigzag et armchair, tandis que la déformation correspondante est de 44% et 35%, respectivement. D'autre part, la contrainte de rupture

diminue à 300K pour atteindre 8.3 N/m et 8.6 N/m le long des orientations zigzag et armchair, respectivement, alors que la déformation correspondante est de 26.86% et 24.45%, respectivement. Le coefficient de Poisson démontre une isotropie avec la valeur $\nu_{xy} = \nu_{yx} = 0.30$ dans les deux sens zigzag et armchair [109].

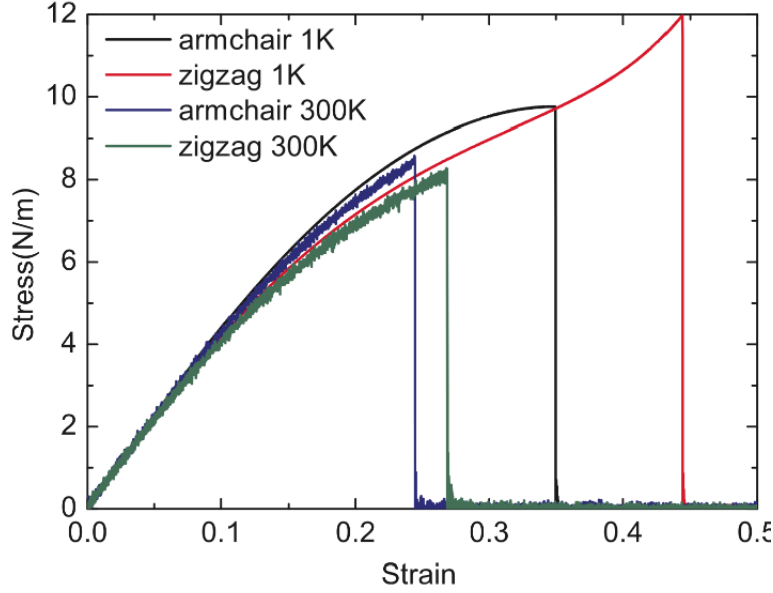


FIGURE III.20 – Courbes de contrainte-déformation d'une feuille d'InSe monocouche sous déformation par tension uniaxiale dans les directions armchair et zigzag à des températures de 1 K et 300 K [47].

Le module de Young du sélénure de gallium (GaSe) peut être obtenu par un ajustement linéaire de la relation contrainte-déformation dans l'intervalle de déformation de $[0, 0.01]$ (cf. Figure. III.21). Alors, le module de Young est de 69.4 N/m et 69.2 N/m respectivement dans les directions armchair et zigzag [109]. La contrainte ultime est d'environ 10.4 N/m à la déformation ultime de 0.27 dans la direction armchair à la basse température de 1K. La contrainte ultime est d'environ 10.5 N/m à la déformation ultime de 0.38 dans la direction zigzag à la basse température de 1K. Lorsque la température augmente à 300K, la contrainte ultime pour atteindre 8.6 N/m et 8.7 N/m le long des orientations zigzag et armchair, respectivement, alors que la déformation correspondante est de 0.22 et 0.19, respectivement. Le coefficient de Poisson démontre une isotropie avec la valeur $\nu_{xy} = \nu_{yx} = 0.25$ dans les deux sens zigzag et armchair [109, 266].

L'effet de la température sur les propriétés mécaniques de l'InSe monocouche a été réalisé par Pham et al [48]. Ils ont déclaré que la résistance à la traction et la déformation à la rupture diminuent avec l'augmentation de la température. Plus précisément, lorsque la température augmente de 1 à 500 K, la résistance à la traction et la déformation à la rupture diminuent de 31.50 % et 48.65 % dans le cas d'une traction

dans la direction armchair. De même, dans le sens zigzag, la résistance à la traction et la déformation de rupture diminuent de 41.79 % et 52.29 %. Les modules de Young diminuent progressivement avec l'augmentation de la température de 1 à 1000 K, les réductions sont d'environ 13% et 12% par rapport à celles de 1 K, respectivement dans les directions armchair et zigzag [47].

Jamil et al [59]. ont réalisé une étude sur les propriétés mécaniques de l'InSe monocouche en fonction des défauts. L'étude suggère que lorsque la concentration de défauts augmente, la résistance à la rupture diminue ainsi que le module d'élasticité. La réduction de la contrainte de rupture, de la déformation et du module d'élasticité dans les directions armchair et zigzag pour modifier le ratio de défauts de cas pure à 5% est de $\sim 43,87\%$, $\sim 29,56\%$, $\sim 24,47\%$, et $\sim 42,61\%$, $\sim 30\%$, $\sim 30,26\%$, respectivement.

Une fissure préfabriquée d'une monocouche InSe chargée sous tension uniaxiale à 300 K, a montré que les propriétés du matériau telles que la contrainte ultime et la déformation de rupture se dégradent. Lorsqu'une fissure préfabriquée est présente dans la structure, le matériau se rompt à une déformation plus faible par rapport à la structure origine, et la résistance à la rupture est également réduite. Bien que la résistance diminue lorsque la longueur de la pré-fissure augmente [59].

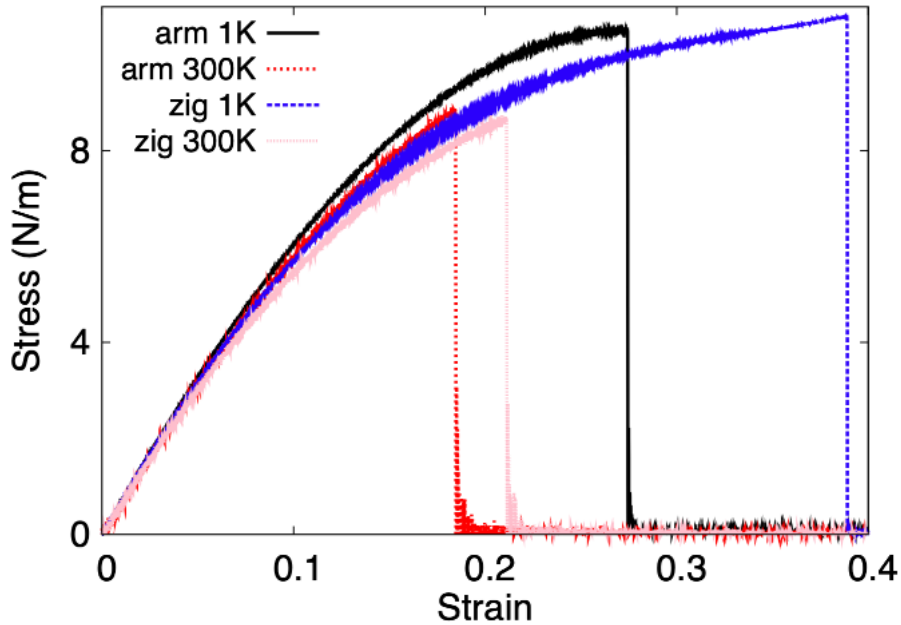


FIGURE III.21 – Relations contrainte-déformation pour la monocouche GaSe étirée uniaxialement le long des directions armchair et zigzag à des températures de 1 K et 300 K. [109].

4.3 Fabrication par PVD et Épitaxie

La production fiable de nano-feuilles de haute qualité est la condition préalable à l'exploration de leurs propriétés et de leurs applications possibles. Jusqu'à présent, de nombreuses méthodes ont été utilisées pour la synthèse de matériaux $M^{III}X^{VI}$ en couches 2D. Nous nous concentrons ici sur plusieurs d'entre elles et évaluons leurs mérites.

Dépôt physique en phase vapeur (PVD)

Dans cette expérience [267], le bateau de silice contenant de la poudre d'InSe (99,99%, Alfar) (20 mg) a été placé au centre du tube (*cf.* Figure III.22). Un morceau de tranche de Si avec une couche supérieure de SiO_2 de 285 nm a été placé en aval à environ 10-15 cm de distance, a servi de substrat pour la croissance de l'échantillon. Un flux d'argon de 60 centimètres cubes standard par seconde (SCCM) fournit une atmosphère inerte et transporte également le gaz InSe vaporisé pour se déposer sur la surface de SiO_2/Si . La poudre InSe a été chauffée à 830° en 30 min et maintenue à 830° pendant 5 min à 20 min pour la croissance des couches atomiques InSe. Ensuite, le système a été refroidi à température ambiante.

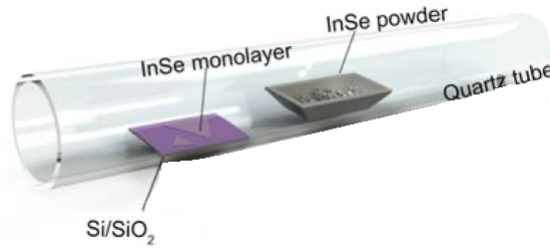


FIGURE III.22 – Couches InSe synthétisées via la méthode PVD en utilisant la poudre InSe comme précurseur. Une tranche de SiO_2/Si a été utilisée comme substrat.[267].

Épitaxie de Van der Waals

Une des conditions requises pour la croissance par épitaxie vdW est que la surface du substrat soit chimiquement inerte (sans liaisons pendantes en surface). Les substrats courants pour cette méthode comprennent le mica, le graphène, le BN, etc. Comme l'énergie associée à la force vdW (40-70 meV) est beaucoup plus faible que l'énergie de liaison covalente (200-6000 meV), l'hétérostructure épitaxiale est réalisable même si le décalage de réseau est important entre les matériaux [268]. Croissance par épitaxie vdW combinée à un traitement de surface. L'objectif de ce dernier est de contrôler le site de nucléation. Jusqu'à présent, la gravure au plasma d'oxygène et l'impression en taille-douce ont été utilisées pour définir efficacement les sites de nucléation des nanofeuilles de GaSe et d' In_2Se_3 sur le mica. Comme le montrent les figures III.23 (a), III.23 (b) et

III.23 (e), l'emplacement des nanofeuilles d' In_2Se_3 et de GaSe cultivées sur la surface du graphène ou du mica est aléatoire [269, 270]. Cependant, après une gravure sélective au plasma d'oxygène, les nanofeuilles ne se nucléent que dans les régions non gravées, ce qui donne des nanofeuilles d' In_2Se_3 et de GaSe à motifs, comme le montrent les figures III.23 (d), III.23 (f) et III.23 (g). Une autre méthode pour contrôler les sites de nucléation est l'impression en taille-douce [271]. Le processus de cette méthode est illustré schématiquement dans la figure III.23 (h). Le Polydiméthylsiloxane (PDMS) avec des structures conçues a été préparé à l'avance par un processus standard de photolithographie et de moulage de répliques [272]. Une encre à solvant composée d'oligomère de PDMS se dissolvant dans l'acétone, l'éthanol et le cyclohexane a ensuite été déposée sur la surface du tampon PDMS préparé. Une feuille de mica fraîchement clivée a été placée face à face avec le tampon PDMS. Ensuite, les empreintes ont été laissées sur la région sans contact et le mica traité a été immédiatement utilisé pour la croissance de matériaux 2D. L'observation in situ a indiqué que les nano-feuilles de Bi_2Se_3 préféraient se nucléer au bord des agrégations de résidus supplémentaires et s'étendaient ensuite à la région sans résidus d'encre. Au fur et à mesure que le temps de croissance augmente, les noyaux finissent par fusionner pour couvrir toute la région contactée par le tampon PDMS. Ce processus est illustré sur la figure III.23 (i). Les techniques basées sur l'épitaxie vdW et la gravure de surface permettent de réaliser un modèle à grande échelle de matériaux $M^{III}X^{VI}$ en couches 2D, fournissant ainsi une base pour les dispositifs électroniques et optoélectroniques de la prochaine génération.

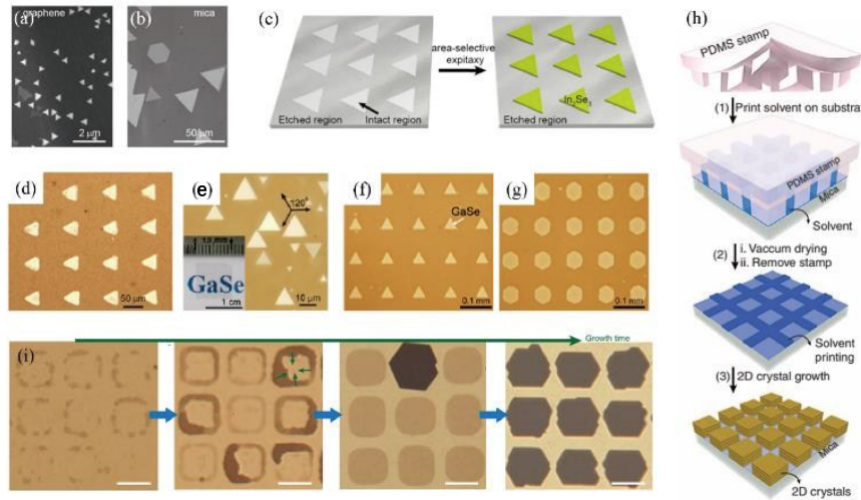


FIGURE III.23 – (a-b) Image au microscope électronique à balayage (MEB) de flocons In_2Se_3 cultivés respectivement sur graphène et du mica. (c) Image schématique illustrant la croissance de la zone sélective d' In_2Se_3 par gravure au plasma d'oxygène. (d) Image optique de flocons In_2Se_3 structurées, cultivés sur mica modifié. (e) Image optique de nanofeuilles de GaSe cultivées sur mica. (f-g) Image optique de réseaux de GaSe par croissance sélective. (h) Image schématique illustrant le processus d'impression en taille-douce. (i) Image optique de cristaux de Bi_2Se_3 cultivés sur mica à différentes étapes.[255]

5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les allotropes du carbone les plus connus qui ne sont autres que le graphite, le diamant, la lonsdaléite, le fullerène et les nanotubes de carbone. Ensuite, nous avons détaillé quelques résultats concernant les propriétés mécaniques du graphène. Puis, nous avons présenté les propriétés structurales et mécaniques des matériaux bidimensionnels à structures hexagonales à base de silicium, de bore et de la famille $M^{III}X^{VI}$. De plus nous avons défini les différentes méthodes de synthèse du SiC, du borophène et du InSe, en particulier, nous avons détaillé quelques-unes comme l'exfoliation humide pour nanofeuilles de SiC, l'exfoliation en phase liquide pour borophène, et le dépôt physique en phase vapeur (PVD) pour InSe. Dans le cas des propriétés mécaniques, les modules élastiques tels que la contrainte de traction à la rupture, la déformation ultime et le module de Young diminuent avec l'augmentation de la température et la présence de défauts structuraux. Cette observation est satisfaisante pour tous les nanomatériaux étudiés dans ce chapitre. Nous avons brièvement décrit les nanomatériaux hybrides SiC, SiGe, borophène et BO qui constituent l'objet de nos contributions dans ce domaine. Le contenu de notre travail a été rapporté dans le dernier chapitre.

Chapitre IV

Contributions et Résultats

Les matériaux 2D basés sur les groupes III et IV ont fait l'objet de nombreuses recherches en raison des propriétés uniques révélées par le graphène, qui ont permis leur incorporation rapide dans le domaine des applications modernes [273, 274]. Concurrent du graphène dans la même colonne, le silicène présente une structure stable et des propriétés électroniques importantes [275]. Depuis, le silicène est plus utilisé dans les dispositifs nanoélectronique comparé au graphène [276, 277]. Ainsi, la recherche se développe sur l'hybridation du Si avec ses analogues de la colonne IV. Cette hybridation donne lieu à des matériaux qui constituent les propriétés des précurseurs, propriétés recherchées dans le domaine des nanotechnologies et micro. Les feuilles hybrides à base de Si telles que le carbure de silicium (SiC) et silicène-germanène (SiGe) sont des semi-conducteurs bidimensionnels qui présentent respectivement une structure hexagonale planaire et hexagonale ondulé (*buckled*). Ce qui a prouvé son applicabilité dans les dispositifs de systèmes microélectromécaniques (MEMS) et les applications sans fil. Cela en a fait l'objet principal de notre première publication, qui étudie les propriétés structurales et mécaniques du SiC et du SiGe dans les cas purs et défectueux.

Un autre matériau 2D de la colonne III, le borophène, suscite un intérêt croissant car il est plus résistant et plus flexible que le graphène dans certaines configurations, avec des caractéristiques métalliques, et il est prometteur pour être utilisé comme électrodes et interconnexions dans les nanodispositifs flexibles [38]. Ce qui nous a motivé à l'étudier de notre point de vue, et c'est le sujet de notre deuxième publication.

La ténacité à la rupture est une propriété qui décrit la capacité d'un matériau contenant une fissure à résister à une fracture supplémentaire. Elle est égale à $4 \text{ MPa}\sqrt{m}$ pour le graphène [155], ce qui signifie une fracture fragile et rapide. Nos dernières publications ont porté sur l'étude et la modulation des propriétés mécaniques des matériaux contenant des fissures. Pour cela, les matériaux hybrides colonnes III-VI ont été un bon choix pour ces études en raison de leurs géométries bicouches uniques qui peuvent entraver la propagation des fissures.

Nos contributions à ce domaine consistent à étudier les propriétés élastiques et structurales des matériaux composites en 2D en simulant la dynamique moléculaire afin de les utiliser dans des applications appropriées tels que les capteurs mécaniques, les dispositifs de port et les systèmes microélectromécaniques (MEMS)

Ce chapitre est consacré à présenter les résultats de nos contributions dans le domaine à travers un résumé détaillé de nos travaux accompagnés par leur contenu dans son intégralité. Nous allons commencer par les descriptions des propriétés élastiques linéaires et les effets de la température et de la vitesse de déformation sur l'élasticité linéaire des matériaux 2D hybrides des groupes IV, V et III-VI. L'apparition de divers défauts structurels tels que les lacunes et les fissures dans les matériaux 2D étant inévitable, leur effet sur le comportement élastique sera présentée dans la section suivante. La troisième partie sera consacrée à des stratégies d'ingénierie des contraintes pour réduire les dommages qu'ils causent par les défauts précités, et améliorer leurs propriétés mécaniques, afin d'en tirer profit.

1 Réponse élastique de matériaux hexagonaux

1.1 Élasticité linéaire

Les matériaux ont un comportement élastique, généralement jusqu'à une certaine charge, appelée "limite d'élasticité". Ainsi, la réponse mécanique d'un matériau homogène, isotrope et linéairement élastique est entièrement caractérisée par deux constantes physiques qui peuvent être dérivées par des expériences simples [278]. Par exemple, une tension ou une compression uniaxiale donne à la fois le module de Young et le coefficient de Poisson. Tout autre paramètre élastique linéaire peut alors être obtenu à partir de ces deux constantes.

Nous avons étudié ici les courbes de contrainte-déformation de plusieurs matériaux 2D sous tension uniaxiale dans les directions armchair et zigzag, comme le montrent les figures IV.1, IV.2, IV.3 et IV.4. Dans le tableau IV.1 on a présenté trois grandeurs de base de l'élasticité linéaire de tous nos matériaux 2D hybrides qu'on a traité dans cette thèse qui sont le module de Young, la résistance à la traction et la déformation à la rupture. Gardez à l'esprit que le module de Young dans tout ce qui suit est obtenu en utilisant la régression linéaire sur la partie linéaire initiale de la courbe contrainte-déformation.

A partir du tableau IV.1, nous pouvons distinguer les différences dans les propriétés élastiques de nos matériaux. Principalement, les trois matériaux Graphène, SiC et SiGe du groupe IV représentent des valeurs de module de Young le long de la direction

1. Réponse élastique de matériaux hexagonaux

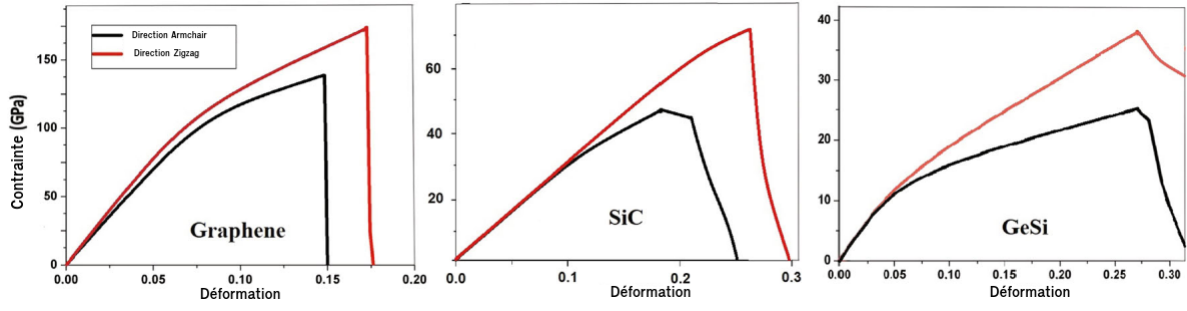


FIGURE IV.1 – Courbes de contrainte-déformation sous tension uniaxiale dans les directions armchair et zigzag à température ambiante pour une feuille de graphène, un hybride de SiC et une monocouche de SiGe.

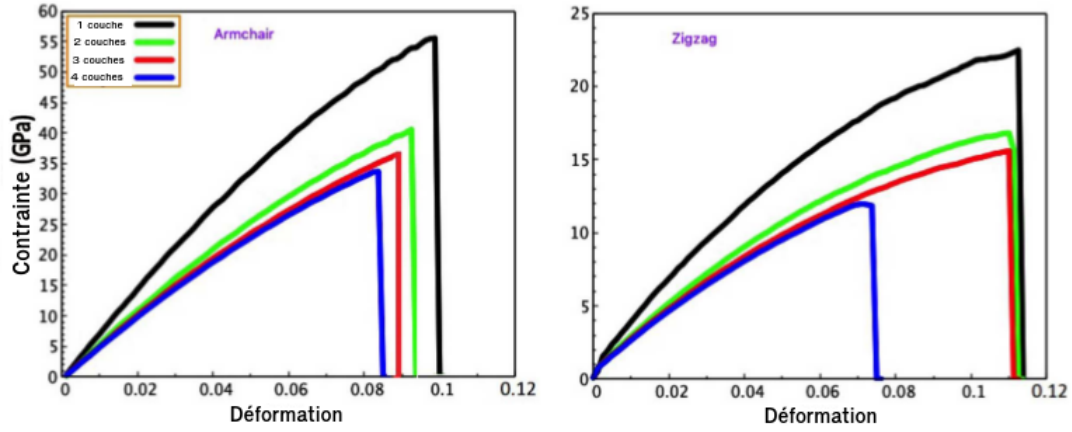


FIGURE IV.2 – Courbes de contrainte-déformation sous tension uniaxiale dans les directions armchair et zigzag à température ambiante pour un borophène multicouche

Matériaux	Module de Young (N/m)	Résistance à la traction (N/m)	Déformation à la rupture (%)	Température (K)
Graphène	355 (zigzag)	58.33	17.25	300
	348 (armchair)	46.4	15	
SiC	163.43 (zigzag)	14.3	17.25	300
	163.2 (armchair)	9.28	15	
SiGe	22.62 (zigzag)	9.55	27	300
	22.60 (armchair)	6.4	27	
Borophene	~167 (zigzag)	~10	11.24	300
	~393 (armchair)	~26	9.87	
BO	300.8 (zigzag)	~44	13.38	300
	301.18 (armchair)	~ 44	11.67	
InTe	32.35 (zigzag)	3.94	19	300
	32.94 (armchair)	4.08	17	

TABLEAU IV.1 – Grandeurs élastiques de matériaux 2D asymétriques à 300 K dans les directions zigzag/armchair.

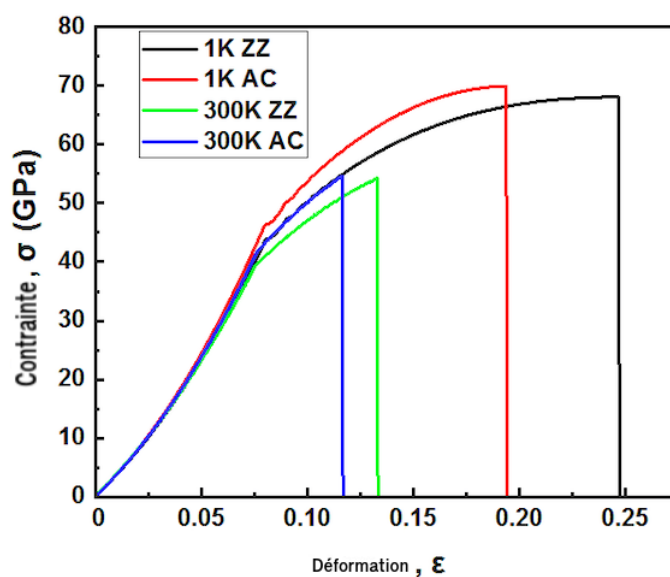


FIGURE IV.3 – Courbes de contrainte-déformation sous tension uniaxiale dans les directions armchair et zigzag pour oxyde de bore hexagonal 2D

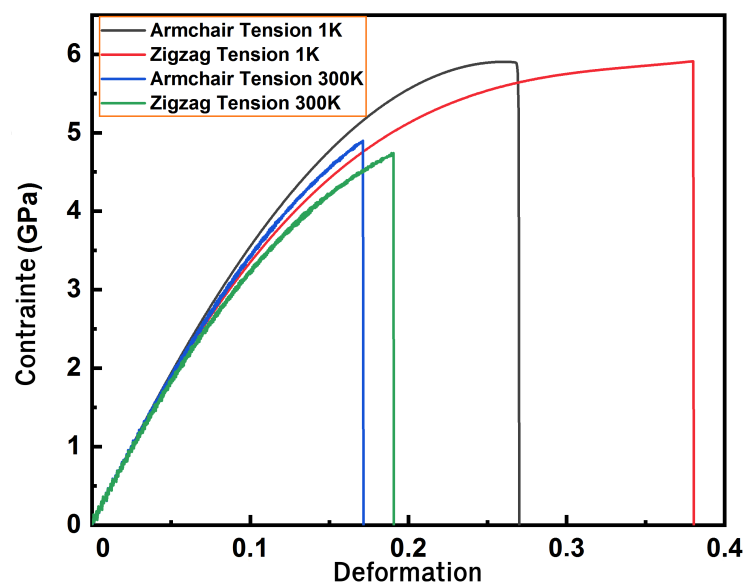


FIGURE IV.4 – Courbes de contrainte-déformation sous tension uniaxiale dans les directions armchair et zigzag pour une feuille de tellure d'indium (InTe).

zigzag de $355N/m$, $163.43N/m$ et $22.62N/m$ respectivement, alors que leurs valeurs correspondantes le long de la direction armchair sont $348N/m$, $163.2N/m$ et $22.60N/m$, respectivement. Ce qui montre un certain degré de rigidité de ces matériaux 2D. Le graphène présente le matériau le plus rigide tandis que le SiGe présente celui le moins rigide. Bien qu'il soit moins rigide que le graphène, le SiC présente un module de Young plus élevé que le silicène, le germanène et le stanène [173], ce qui confirme le rôle positif résultant de l'hybridation d'un élément des matériaux bidimensionnels du groupe IV avec le graphène, qui était absent dans le cas de SiGe. De plus, tous les paramètres élastiques présentent des valeurs plus élevées le long de la direction zigzag par rapport à la direction armchair, ce qui est en bon accord avec les études précédentes sur les feuilles de stanène, silicène et germanène [17, 173].

Pour les matériaux 2D des groupes III et III-VI au même tableau IV.1, ils présentent des valeurs de module de Young élevées de $\sim 167N/m$, $300.8N/m$ et $32.35N/m$ le long de la direction zigzag et valeurs de $\sim 393N/m$, $301.18N/m$ et $32.94N/m$ le long de la direction armchair révélés pour le borophène, BO et InTe respectivement, ce qui met l'accent sur leurs rigidités. Par rapport aux analogues du quatrième groupe, il est clair que le module de Young le plus élevé, qui indique une rigidité élevée, se réfère à l'oxyde de bore (BO) sans mentionner le graphène le matériau le plus rigide mesuré, tandis que le module inférieur se réfère au SiGe, indiquant celui le moins rigide. En conclusion, on en déduit que le module de Young des matériaux hybrides 2D diminue lorsque la masse atomique moyenne des constituants du réseau hexagonal augmente, ce qui est clairement observé entre SiC/ SiGe et BO/InTe.

La capacité des matériaux à résister à la rupture et à résister aux changements de forme sans formation de fissures est également étudié en à travers la résistance à la traction σ et la déformation à la rupture ε comme il est indiqué dans le tableau IV.1. L'étude de la capacité de ces matériaux à résister à la rupture ont montré des résultats considérables et diverses à la fois. Dans la direction zigzag, la résistance à la traction du SiC est inférieure d'environ 58% et 66% à celle des monocouches de graphène et des feuilles de nitrure de bore (BN) [30, 31], respectivement, et elle est inférieure d'environ 54% et 52% le long de l'axe armchair, respectivement. Cependant, le SiC présente une résistance à la traction plus élevée par rapport à d'autres matériaux composés tels que le GaN et l'InN [31] et par rapport à son homologue SiGe qui présente des résistances à la traction 62% et 47% plus faibles dans les directions zigzag et armchair respectivement. Le graphène est plus rigide et moins flexible que la monocouche de SiC et également par rapport à la feuille de SiGe qui est moins rigide et plus flexible. L'oxyde de bore (BO) peut supporter une contrainte de traction plus élevée que d'autres matériaux 2D hexagonaux ondulés tels que l'InSe [47], le InTe et le borophène.

La valeur élevée de la déformation de rupture de la monocouche de SiGe entraîne un

retard dans la formation d’anneaux, de vides et de défauts chimiques (pentagones et triangles) dans le squelette cristallin du matériau avant la rupture.

L’effet de l’empilement des couches de borophène sur leurs propriétés de traction a été étudié dans le tableau IV.2. On met η le nombre de couches atomiques, celui-ci variant de 1 à 4, on empile η les monocouches de bore en configuration AA. Les distances intercouches rapportées pour η borophène dans le tableau IV.2 sont conformes aux valeurs obtenues à partir des calculs DFT [35]. Lorsque le nombre η de couches augmente, la résistance à la rupture (σ), définie comme le pic maximal de la courbe contrainte-déformation, diminue de 55.17/21.29 GPa pour $\eta = 1$ à 33.41/11.21 GPa pour $\eta = 4$ le long des directions armchair/zigzag, respectivement. Le même comportement est montré pour les membranes multicouches MoS_2 en raison de la transition du mécanisme de fracture intraplanaire à interplanaire [279].

En revanche, la variation de la déformation à la rupture est moins prononcée pour η compris entre $\eta = 1$ et $\eta = 4$ et elle est tout à fait négligeable lorsque l’on compare $\eta = 1, 2$ et 3 , en particulier sous chargement en zigzag. Les valeurs du tableau révèlent également une forte anisotropie puisque la résistance aux fractures pour les forces armchair est supérieure à celles en zigzag en raison de la structure ondulée le long de l’axe zigzag. Il s’ensuit que les valeurs du module de Young du borophène monocouche sont plus que doublées, il est notamment 2.3 fois plus grand, pour la déformation en armchair par rapport à la direction en zigzag comme indiqué dans le tableau IV.2. Cette différence s’explique par le fort flambage (*buckling*) dans la direction zigzag. En augmentant η , le module de Young diminue approximativement de 24 à 31% pour les deux charges appliquées. Comparé à d’autres monofeuilles 2D, comme les monocouches de phosphorène, de silicène et de MoS_2 [111, 227, 280], on en déduit que la monocouche de borophène est beaucoup plus résistante. Lorsque l’on augmente η , le module de Young diminue, tandis que le coefficient de Poisson reste quasiment inchangé avec $\nu_x \simeq -0.03$ et $\nu_y \simeq -0.07$. Nos résultats sont en accord avec les multicouches de phosphore noir [227] et de MoS_2 [279]. Ces changements sont principalement attribués à l’effet des interactions de Van der Waals qui sont responsables de l’empilement des différentes couches dans le système [35].

Dans le tableau IV.3, nous mettons en évidence la façon dont le borophène réagit avec les atomes d’azote (N) en étudiant l’influence du N intercalaire situé sur le site du pont (positionné au milieu de la liaison B-B), le nombre d’atomes d’azote varie de 1 à 4 avec différentes distributions générant 12 configurations différentes. Dans ce travail, nous considérons 9 hétérostructures intercalées, à savoir 4N/4L, 3N/4L, 2N/4L, 1N/4L, 4N/3L, 3N/3L, 2N/3L, 1N/3L, 4N/2L, 3N/2L, 2N/2L, 1N/2L, de sorte que 4N/3L fait référence à 4 atomes d’azote par chaque couche intermédiaire, et dans 1N/4L nous avons intercalé 1 atome d’azote entre chaque deux couches alors que 3 atomes d’azote placés

1. Réponse élastique de matériaux hexagonaux

couches	d	Υ_x	Υ_y	σ_x	σ_y	ε_x	ε_y
1	—	349.39	820.03	21.29	55.17	11.24	9.87
2	3.072	264.69	621.23	15.98	40.39	11.21	9.2
3	2.957	247.67	581.29	15.06	37.76	11.18	8.95
4	2.956	239	560.94	11.21	33.41	7.1	8.3

TABLEAU IV.2 – Distances intercouches d en Å, module de Young Υ et résistance σ en GPa, déformation à la rupture ε en (%) pour le borophène multicouche le long des deux directions armchair (-y) et zigzag (-x).

dans l'interdistance entre deux couches est donné par $3N/2L$. Les configurations 2N ne sont pas rapportées car les résultats correspondants sont assez similaires aux cas 1N. Les valeurs du module de Young, rapportées dans le tableau IV.3, montrent une diminution plus significative lors de l'augmentation du nombre de couches η que lors de l'ajout des atomes N à η fixe. Cela peut être attribué à l'influence des interactions de Van der Waals qui deviennent plus fortes à une distance intercouche spécifique et limitent l'effet des atomes d'azote. Dans toutes les configurations, les valeurs les plus élevées du module de Young sont observées le long de la direction y par rapport à celles le long de la direction x. Par rapport à borophène multicouches pur, on peut déduire que l'intercalation rend le matériau plus souple puisque peu de force externe peut le déformer. De plus, le coefficient de Poisson du borophène à couches η intercalées en N conserve son signe négatif, ce qui montre que ces matériaux restent auxétiques le long des axes zigzag et armchair.

Ces résultats ont démontré des propriétés élastiques importantes et diverses de ces matériaux 2D, révélant que par l'hybridation, l'empilement et l'intercalation, nous pouvons modifier leurs propriétés élastiques et les utiliser dans des applications appropriées.

1.2 Effet de la température et de vitesse de déformation

La gestion de la température dans les dispositifs à l'échelle nanométrique devient de plus en plus importante pour son rôle critique dans le contrôle des performances et de la stabilité de ces dispositifs. Les figures IV.5, IV.6, IV.7 et IV.8 présentent l'effet de la température sur les propriétés de traction, telles que la résistance à la rupture, la déformation à la rupture et le module de Young, de nos matériaux 2D hybrides.

On va commencer par l'effet de la température sur les caractéristiques des trois matériaux du groupe IV, graphène, SiC et SiGe. les calculs de la contrainte en terme de

Nombre de couches	Module de Young	1N	3N	4N
2 couches	Υ_x	259	251	245
	Υ_x	617	604	596
3 couches	Υ_x	241	236	233
	Υ_x	570	564	560
4 couches	Υ_x	232	228	224
	Υ_x	552	546	539

TABLEAU IV.3 – Module de Young Υ en GPa pour le borophène multicouche intercalé par des atomes d'azote le long des deux directions armchair (-y) et zigzag (-x).

déformation le long des directions zigzag et armchair donnent la résistance à la rupture et sa déformation correspondante affichée dans la Fig. IV.5.

La contrainte de rupture ultime et la déformation diminuent avec l'augmentation de la température. Plus précisément, sous la température ambiante, à 100 K, la contrainte maximale se produit à des déformations de 17%, 26% et 29% pour les monocouches de graphène, de SiC et de SiGe, respectivement, dans la direction zigzag. Le long de l'axe armchair, elle est d'environ 16.5%, 18% et 30 %, respectivement. À la température la plus élevée $T = 800$ K, la fracture se produit à 15.7% et 13% dans la feuille de SiC, et coïncide avec la déformation de 22.5% et 18% sous des charges en zigzag et en armchair, respectivement pour l'hybride SiGe. Le graphène présente une déformation à la fracture d'environ 15% et 12.5% le long des directions zigzag et armchair à $T = 600$ K. Il s'ensuit que les matériaux présentent une rupture plus précoce à des températures plus élevées en raison des longueurs de certaines liaisons chimiques qui subissent de plus grandes fluctuations et atteignent la longueur de liaison critique puis se rompent. En outre, la diminution des fractures est plus importante dans le sens armchair que dans celui du zigzag. On peut l'expliquer par le fait que, contrairement à la déformation en armchair, la direction en zigzag est plus résistante à la déformation appliquée en raison de l'orientation des liaisons atomiques qui ne sont pas parallèles à la direction de la charge. Par conséquent, la déformation en zigzag peut résister davantage avant la rupture, ce qui se traduit par une déformation ultime plus élevée.

Lorsque l'on augmente la température dans la plage [10-500] K, la figure IV.6 montre une baisse de la résistance à la rupture pour les forces en armchair et en zigzag. Cette diminution est également observée pour la déformation à la rupture correspondante. En augmentant le nombre de couches, la baisse est attribuée à l'effet d'épaisseur en accord avec le MoS_2 multicouche [279]. À souligner également que, à 10 K, la résistance à la rupture qui est de 69.08 GPa et 24.79 GPa pour le borophène à une couche dans les

1. Réponse élastique de matériaux hexagonaux

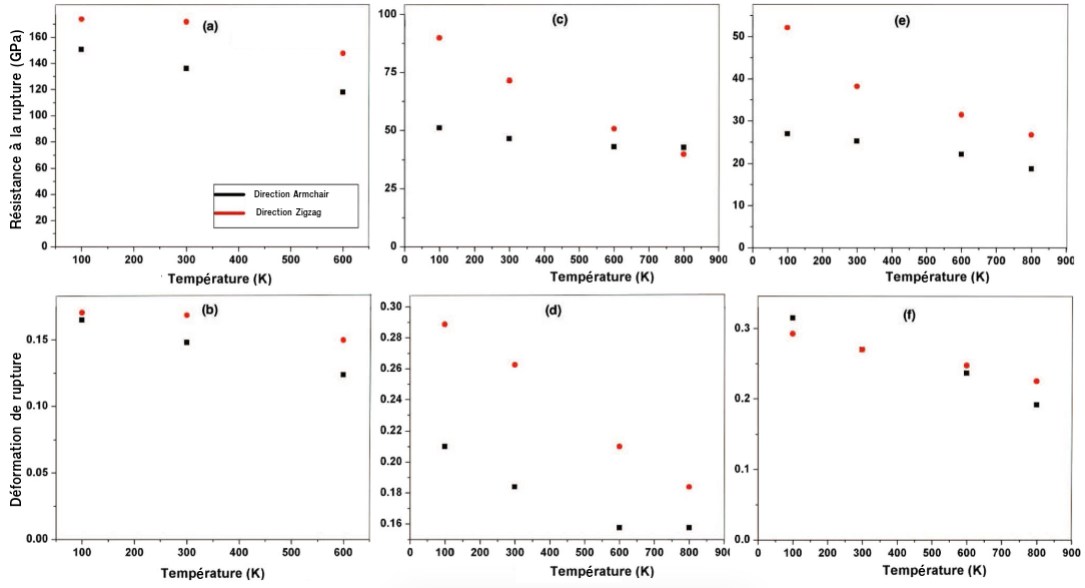


FIGURE IV.5 – Effet de la température sur la résistance à la rupture et la déformation à la rupture dans les directions zigzag et armchair, respectivement pour les cas des feuilles a, b de graphène, c, d de SiC et e, f de SiGe.

directions armchair et zigzag, respectivement, est proche des prédictions des calculs de premiers principes rapportés dans [215, 281]. Ces paramètres commencent à diminuer jusqu'à 500 K, ce qui signifie que des températures plus élevées entraînent une rupture plus précoce, en raison des grandes fluctuations subies par certaines liaisons qui peuvent facilement atteindre le point de rupture pendant la charge appliquée.

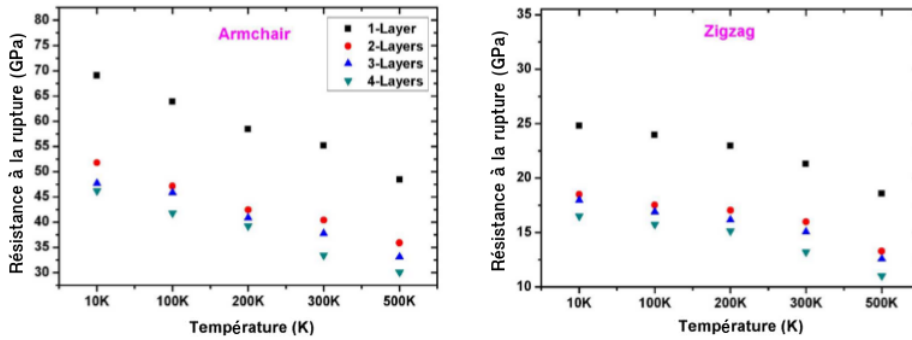


FIGURE IV.6 – Effet de la température sur la résistance à la rupture du borophène multicouche dans les directions armchair et zigzag.

Dans cette partie, nous étudions les propriétés mécaniques de la monocouche BO en fonction de la température de 1 à 900 K. Comme le montre la figure IV.7, à une température fixée, la déformation à la rupture est plus sensible à la direction de chargement

par rapport à la résistance à la rupture. La différence entre les valeurs de déformation dans la direction zigzag par rapport à la direction armchair, pourrait s'expliquer par l'influence de l'emplacement de la liaison le long de l'orientation de chargement. Plus précisément, lorsque la feuille BO soumise à une charge de traction le long de la direction zigzag, elle fait face à certaines liaisons horizontales qui peuvent supporter une plus grande déformation en traction avant la rupture. De plus, la résistance à la rupture (déformation) diminue d'environ 48% (60%) dans la direction armchair et de 47% (66%) dans la direction zigzag lorsque la température augmente de 1 K à 900 K en conséquence.

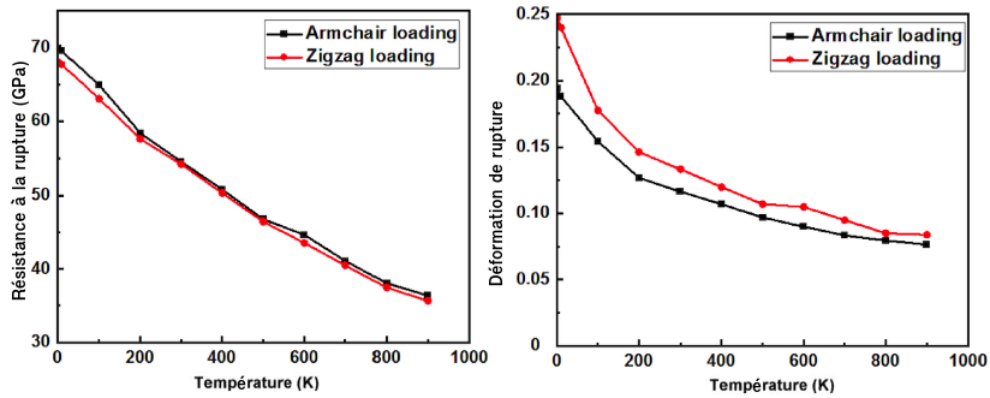


FIGURE IV.7 — Variations de la résistance à la rupture et de la déformation à la rupture d'une feuille BO monocouche en fonction de la température pour une charge directionnelle en armchair et en zigzag.

Pour le module de Young, la figure IV.8 montre sa diminution au fur et à mesure que la température augmente. La réduction est d'environ $\sim 4,7\%$ le long de la direction armchair et $\sim 4\%$ le long de la direction zigzag pour une température allant de 1 K à 900 K, respectivement. La faible différence des valeurs du module de Young, observée lors de l'augmentation de la température, affirme l'isotropie de la monocouche BO. Par conséquent, la température détériore les propriétés mécaniques du BO monocouche. Ces détériorations peuvent être attribuées aux longueurs des liaisons chimiques qui subissent plus de fluctuations thermiques à haute température ce qui conduit à la rupture plus précoce.

Nous concluons que l'effet de la température sur les propriétés de traction de nos matériaux 2D du groupe IV est plus important dans la direction armchair que dans la direction zigzag. Même avec les couches empilées de borophène, l'effet de la température reste considérable. L'oxyde de bore hexagonal 2D (BO) révèle qu'à une température fixée, la déformation à la rupture est plus sensible à la direction de chargement par rapport à la résistance à la rupture. Ces données peuvent servir de guide pour une

utilisation dans les applications extensibles et dans les futurs dispositifs thermomécaniques.

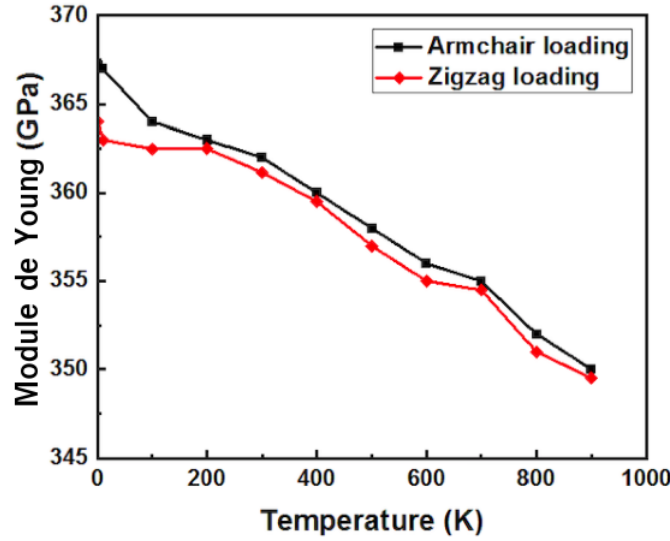


FIGURE IV.8 – Effets de la température sur le module de Young de BO monocouche sous tension uniaxiale dans les orientations armchair et zigzag.

Effet de la vitesse de déformation L'effet de la vitesse de déformation en traction appliquée, définie comme la variation de la déformation d'un matériau en fonction du temps, sur les propriétés mécaniques du SiC, du SiGe et du borophène multicouche est examiné à différentes températures. Comme le montre la figure IV.9, dans l'intervalle de vitesse de déformation $[0,01, 0,09] \text{ Ps}^{-1}$, la résistance à la rupture et la déformation à la rupture augmentent légèrement avec l'augmentation de la vitesse de déformation et suivent presque une tendance générale. Cela s'explique par le fait qu'à une vitesse de déformation plus faible, les atomes ont plus de temps pour les fluctuations thermiques, ce qui augmente les chances de surmonter la barrière énergétique pour rompre les liaisons à une force plus faible.

Dans la figure IV.10, à η fixe, l'augmentation de la vitesse de déformation entraîne une légère augmentation de la résistance à la rupture. Plus précisément, à 200 K, la résistance à la rupture de monocouche du borophène dans les directions armchair et zigzag augmente jusqu'à (3.6, 13.7%) et (5.8, 12.3%), respectivement. Alors qu'elles atteignent (6.3, 16.7%) et (5, 4.3%), respectivement pour la 4-couches du borophène. Notez qu'une raison possible pour les augmentations de la résistance à la rupture à η fixe est due au fait qu'à une vitesse de déformation plus lent, les atomes ont plus de temps pour répondre aux fluctuations thermiques. Par conséquent, la possibilité de surmonter la barrière énergétique pour rompre les liaisons à une force inférieure augmente.

Lorsque l'on augmente $\eta = 1$ à 4, la résistance à la rupture à 800 K chute d'environ 30% le long des directions armchair et zigzag respectivement, révélant un effet moins significatif de la vitesse de déformation sur le nombre de couches par rapport à l'influence de la température, comme cela est évidemment observé pour $\eta = 2$ et 3. Il s'ensuit que les interactions de Van der Waals et la structure ondulée du borophène sont les principaux responsables des variations opposées des paramètres de rupture en termes de directions η et x/y.

En résumé, l'examen de l'effet de la température sur la résistance à la rupture et la déformation montre que ces structures en nid d'abeille sont plus sensibles à la température qu'à la vitesse de déformation.

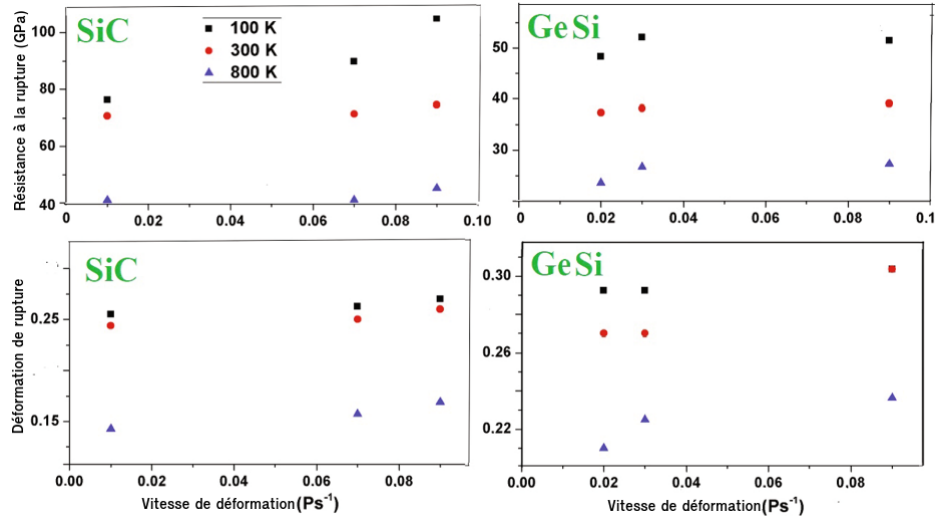


FIGURE IV.9 – Variation de la résistance à la rupture et de la déformation à la rupture des feuilles de SiC et de SiGe, respectivement, en fonction de la vitesse de déformation à différentes températures..

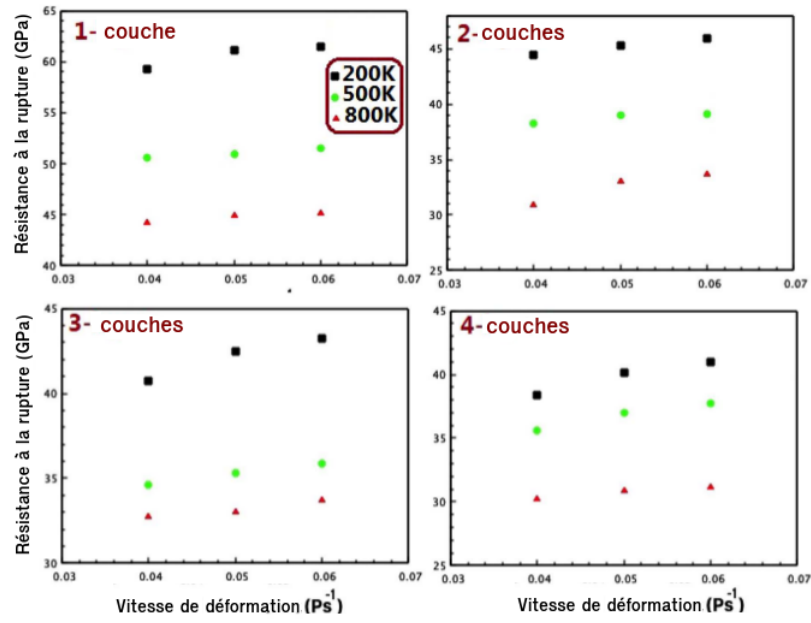


FIGURE IV.10 – La variation de la résistance à la rupture du borophène multicouche en fonction de la vitesse de déformation à différentes températures dans la direction armchair.

1.3 Contribution I

Contribution I

Ingénierie de la déformation thermique des propriétés mécaniques des feuilles hybrides à base de Si par des simulations de dynamique moléculaire

Résumé

Après le premier isolement réussi du graphène, et en raison de ses propriétés mécaniques exceptionnelles qui sont les plus élevées jamais obtenues, une attention considérable a été portée aux analogues de la même colonne du tableau périodique. Récemment, les matériaux hybrides à base de Si ont fait l'objet de nombreuses recherches en vue de leur application possible dans les microsystèmes électromécaniques (MEMS) dispositifs et les applications sans fil.

Dans ce premier article, nous avons étudié les propriétés structurales et mécaniques des hybrides SiC et SiGe en les comparant avec son homologue qu'est le graphène. Nous réalisons pour la première fois, une combinaison entre la performance mécanique des feuilles défectueuses à base de Si (défaut de lacune) et la gamme élevée de température avec des valeurs spécifiques de vitesse de déformation. Notre résultat montre que sous la charge uniaxiale, les systèmes présentent un étirement de leurs liaisons atomiques, ce qui entraîne la formation d'anneaux, de vides et de défauts chimiques (pentagones et triangles). Le squelette cristallin devient moins lié, donc il perd sa rigidité. Par rapport à la monocouche de SiGe pure et défectueuse, la feuille de SiC présente un module de Young et des valeurs de rupture plus élevés, qui diminuent tous deux avec la température, tandis que la vitesse de déformation les améliore. Dans les hybrides défectueux, nous avons constaté que les défauts ponctuels réduisent les valeurs de la résistance à la rupture et de la déformation sans affecter le comportement fragile des feuilles.



Thermal strain engineering of mechanical properties in Si-based hybrid sheets via molecular dynamics simulations

K. Sadki^{1,2} · M. Saaoud¹ · L. B. Drissi^{1,2,3}

Received: 22 December 2020 / Accepted: 28 July 2021

© The Author(s), under exclusive licence to Springer-Verlag GmbH Germany, part of Springer Nature 2021

Abstract

The mechanical properties of pristine and defective Si-based hybrid sheets are studied using molecular dynamics calculations for a temperature ranging from 100 to 800 K, in conjunction with a variable strain rate. When increasing temperature, the melting phase of the hybrids occurs from the solid to the liquid phase, while the increase in the strain rate enhances their elastic parameters. The absence of plastic stage reveals that the fracture pattern is brittle in these 2D materials. Under the uniaxial loading, the systems stretch, resulting in the failure of the crystalline skeletons that lose their rigidity with anisotropic behavior observed only for SiC. In defective hybrids, the point defects reduce the values of fracture strength and strain without affecting the brittle behavior of the sheets. The results impart that coupling high temperature to SiC material offers new possibilities for MEMS devices, whereas SiGe is a promising candidate for microelectronic devices.

Keywords Group IV hybrids · Thermal effect · Vacancy defects · Elastic parameters · Molecular dynamics simulations

Introduction

Since the first isolation of graphene in 2004 by mechanical exfoliation from graphite [1], this 2D material has shown a vast number of applications such as energy storage [2–4] and field-effect transistors [5–7]. In the last 15 years, graphene was fabricated using different production processes such as chemical vapor deposition (CVD) that introduces structural defects into the honeycomb lattice [8]. Indeed, chemical treatment generates vacancies, dislocation, and Stone–Wales type defects in graphene network [9]. Both experiments and computational methods allow exploring many physical properties of graphene such as vibrational, thermal, electronic, and transport properties. In particular, graphene shows exceptional mechanical

characteristics summarized in its extremely high Young's modulus and fracture strength [10].

A wave of studies on group IV elemental 2D materials has paved the way to new classes of graphene analogues such as silicene, germanene, stanene, and plumbene composed of only one atom belonging to group IV in the periodic table. With four electrons in their valence band, Si, Ge, Sn, and Pb atoms do not form sp^2 bonds in the corresponding 2D sheets due to their large ionic radius. It results in that the crystalline lattices of silicene and germanene are slightly buckled [11]. Therefore, unlike graphene, where the atoms are arranged in a perfectly planar honeycomb structure, the atom hybridization in silicene and germanene is between sp^2 and sp^3 . Experimentally, the epitaxial growth of silicon on solid surfaces has been proposed to fabricate a silicene sheet. The first successful synthesis of silicene was realized on Ag(111) and $ZrB_2(0001)$ surfaces [12, 13], then silicene was also successfully grown on an iridium (111) surface [14]. Germanene was also manufactured using several substrates such as Pt (111) and Al (111) [15, 16].

The study of two-dimensional honeycomb materials using molecular dynamics simulations (MD) have received widespread attention in the last decade. Classical MD simulations showed perfect linear elastic behavior at 0 K for graphene, while at room temperature, high Young's modulus and Poisson ratio were observed along the armchair

✉ L. B. Drissi
ldrissi@fsr.ac.ma; b.drissi@academiesciences.ma

¹ LPHE, Modeling & Simulations, Faculty of Science, Mohammed V University in Rabat, Rabat, Morocco

² CPM, Centre of Physics and Mathematics, Faculty of Science, Mohammed V University in Rabat, Rabat, Morocco

³ College of Physical and Chemical Sciences, Hassan II Academy of Sciences and Technology, Km 4, Avenue Mohammed VI, Rabat, Morocco

and zigzag loadings [17]. Thus, incorporating graphene with other materials enhances interfacial bonding strength [18]. During the tensile loading, strong plasticity behavior is observed in hybrid graphene and hexagonal boron nitride sheet [19]. The corrugated structure of layered borophene along the zigzag direction renders its Young's modulus and ultimate tensile stress higher along the armchair loading than the zigzag one [20]. In pure silicene, the lattice is stable up to 17% under biaxial tensile strain [21]. Compared with its bulk counterparts, the Young modulus of silicene is lower, while its fracture strength is higher, making silicene more flexible to deform but harder to break [22]. Furthermore, both the fracture stress and deformation decrease, in silicene, as the temperature increases, whereas they increase slightly with the strain rate [22]. Nano-reinforcements of Si-based materials elucidate the interaction mechanisms between 2D materials and inorganic hosts [23]. In stanene, the Young modulus decreases with temperature along both uniaxial and biaxial loadings [24]. Due to its high buckled structure, germanene shows a tensile strength that is about 11 to 12 times smaller than that of graphene and displays a strain-induced self-doping phenomenon [25].

The various results obtained for the available 2D group IV one-atomic crystals have generated a strong interest exceeding the list of group IV mono-elements to include group III-V compounds sheet [26, 27] and group IV-IV hybrids [28–30]. Other types of elementary materials have been also synthesized, like the transition metal dichalcogenides MoS_2 , $NbSe_2$, and WS_2 [31, 32] and II–VI zinc oxide ZnO [33, 34]. As far as concerns the mechanical properties, SiGe and graphene-based hybrids, such as SiC and CGe, exhibit special elastic parameter values. SiGe is hard to break among the other (2D) group-IV monolayers [35]. Compared with graphene, SiC hybrid is less stiff and twice stronger [36, 37]. Passing from the monolayer SiC to the bilayer induces extra flexibility in hybrid [38]. For SiC hybrids, MD calculations report a Young modulus of 174–169.6 N/m in the zigzag direction and 171–173.4 N/m in the armchair one [39, 40]. At high temperature, intrinsic thermal excited ripples are observed in hexagonal hybrids [41]. Research on the mechanical characterization of binary compounds, such as SiC and SiGe sheets, shows that the fracture stress and strain in the zigzag direction are almost higher than those along the armchair axis [42]. Furthermore, the nonlinear and thermoelastic behaviors of 2D C-based hybrids reveal very potential candidates for automotive and aeronautical industries as well as heat spreader electronics devices [43].

Despite the importance of MD simulations in exploring the rupture and the melting phase in materials as well as the effects of defects on mechanical properties, to date, quite limited studies on 2D materials exist. More particular, no study from the literature has focused on

the combination between the mechanical performance of Si-based defective sheets (vacancy defect) and the high range of temperature with specific strain rate values in the same investigation. Consequently, we believe that understanding the performance of SiC and SiGe sheets based on some key factors like mechanical properties and behavior up to rupture in the aforementioned circumstances is of fundamental importance for the advanced development of nanoscale devices such as MEMS. This work provides a study of the effect of thermo-strain on the mechanical properties of pristine and defective graphene, SiC, and GeC hybrid materials using MD calculations. It is found that SiC (/SiGe) hybrid is more flexible (/less stiffer) than graphene. The fracture stress and strain decrease as the temperature increases, while an increase in the strain rate enhances them. The Young modulus of defective SiC and SiGe decreases as the number of defects increases, and brittle fracture behavior is observed for both pristine hybrids and their defective analogs. The investigation of strain-temperature on the elastic response of 2D materials can be used in thermoelastic applications.

In what follows, we present a detailed analytical framework in “[Method of calculations](#).” The results are reported and discussed in “[Results and discussion](#).” The conclusion is given in the last section.

Method of calculations

Molecular dynamics simulations are performed using the program LAMMPS [44]. The interatomic interactions are sampled by means of the Tersoff potential [45] that is commonly used and considered as most proper and consistent for simulating the atomistic behavior of different inorganic nanosheets due to accurate parameterization that helps in reaching accordance with the DFT computations and experimental results, and for the corresponding parameters cited in this work especially the cutoff R and S which are helping in improving the accuracy of calculations [46, 47].

All calculations are performed using a (20×20) hexagonal supercell that contains 800 atoms with periodic boundary conditions applied along the planar directions (X, Y), in agreement with [48, 49] investigating the thermodynamic and the mechanical properties of graphene monolayer. The SiC and SiGe monolayers are fully relaxed until a thickness of 2 and 2.5 Å are obtained respectively. The relaxed Tersoff potential parameters are equal to B : 432.154 and 444.7177 (eV), h : -0.3395 and -0.5982 , R : 2.3572 and 2.8995 Å, S : 2.6626 and 3.1996 Å, for SiC and SiGe monolayers, respectively. The mechanical properties have been estimated by imposing a uniaxial tension along the armchair and zigzag directions as indicated in Fig. 1. The simulations were

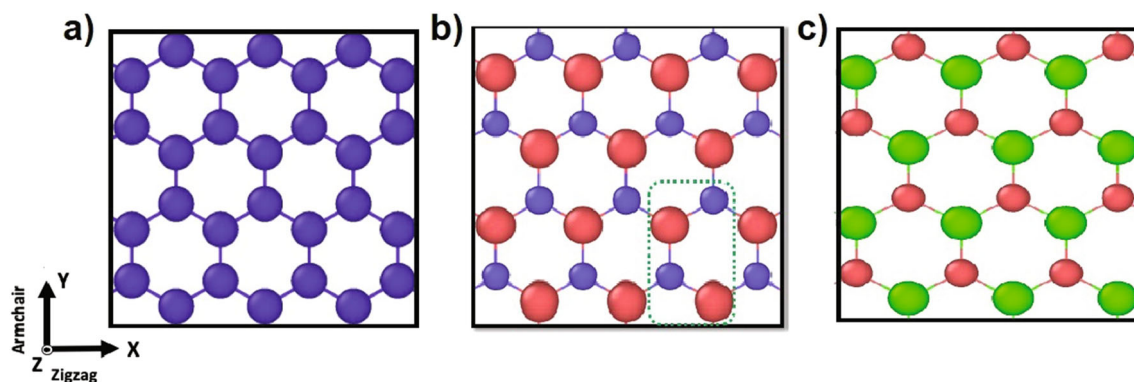


Fig. 1 Relaxed geometrical structures displaying **a** graphene, **b** SiC, and **c** SiGe sheets. Blue, red, and green balls represent C, Si, and Ge atoms respectively

carried out with temperatures ranging from 10 to 800 K in conjunction with a set of strain rates from 0.01 to 0.09 ps⁻¹. Notice that the stress and the strain at maximal stress values beyond the temperature interval do not display interesting variations. The Nose-Hoover barostat (NPT) ensemble (fixed number of atoms, pressure, and temperature) is used in all simulations with a temperature damping constant of 0.1 ps and pressure damping constant of 1 ps. Each of the deformation simulations was run until the failure of sheet and a time step of 0.25 fs was used for all MD simulations.

Results and discussion

In this section, we study three 2D hexagonal structures, namely graphene monolayer, and SiC and SiGe hybrids displayed in Fig. 1. Using molecular dynamics (MD) simulation, the effect of strain and temperature on the structural and elastic properties of the three materials is investigated and discussed. We start by calculating the equilibrium lattice constant for SiC and SiGe monolayers to test the accuracy of the Tersoff potential that is commonly used and considered as most proper and consistent for

simulating the atomistic behavior and thermal response of different inorganic nanosheets relied on 800 atoms [41, 47, 50, 51] as the ones employed in this study.

In the honeycomb structure, each C atom binds three Si or Ge atoms as displayed in Fig. 1. The optimized bond lengths reported in Table 2 are in good agreement with previous DFT results [28, 38]. Furthermore, in contrast to planar graphene and SiC monolayers that show *sp*² hybridization, the SiGe hybrid exhibits a small buckling parameter of 0.58 Å.

In SiC and SiGe hybrids, the presence of bridging carbon/germanium atoms which connect with two silicon atoms chiefly contributes to the connectivity of Si network as displayed in Fig. 2. To assay the structural form and connectivity of our Si-based materials, Table 1 lists the indicator of Q species of Si defined by the number of bridging carbon/germanium atoms it forms covalent bonds with Si atoms.

Figure 2 shows Q3 denoting the middle silicon connected with three bridging carbon (germanium) atoms in SiC (SiGe) structure; Q1 is designating the silicon atoms attracting only one bridging carbon/germanium atom, and Q2 for two bridging atoms. The calculations of the distribution of Q species for pristine SiC and SiGe, with dearth

Fig. 2 Schematic illustrations of Q species. Blue balls denote carbon or germanium atoms and red balls refer to silicon atoms

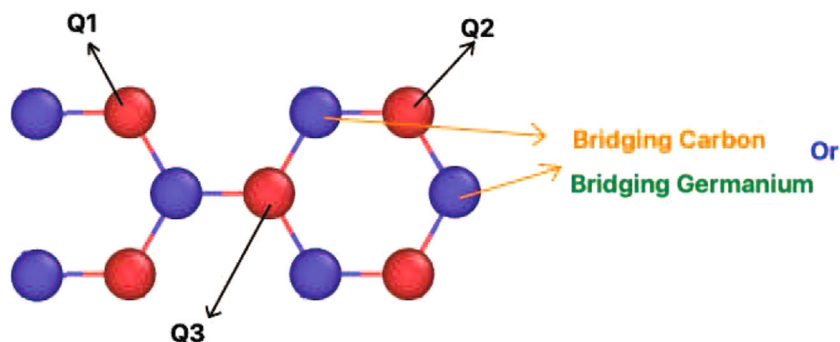


Table 1 Q species distribution of pristine SiC and SiGe after structural relaxation

Structure	$Q_0(\%)$	$Q_1(\%)$	$Q_2(\%)$	$Q_3(\%)$	$Q_4(\%)$
SiC	0	5	4.75	90.25	0
SiGe	0	5	4.75	90.25	0

of Q_0 and Q_4 , indicate that Q_1 , Q_2 , and Q_3 mainly dominate large fractions, respectively, where the high parameter of Q indicates the strong connectivity of the structures. In fact, the high abundance of Q_3 is due to the fact that it is situated in the middle of a honeycomb structure allowing covalent bonds to provide high connectivity Q_3 species, which increases the integrity of the SiC and SiGe sheets. Notice that Q_0 and Q_4 , denoting a silicon network with none and all connecting carbon/germanium atoms being bridged, are not present in our hexagonal structures, unlike that observed in calcium silicate hydrate with 2D-silica intercalated [23, 59].

Effects of temperature and strain rate

To further test our approach for mechanical properties, we start by performing simulations for graphene sheet and reproducing some results. The Young modulus, tensile strength, and fracture strain of the pristine graphene deduced from the stress-strain curves plotted in Fig. 3a are listed in Table 2. The present values concord well with the ones obtained by MD simulations [39, 46, 47] and $340 \text{ N}\cdot\text{m}^{-1}$ measured using nanoindentation in an atomic force microscope [52]. The tensile strength and fracture strain along the zigzag and armchair directions agree with the data reported in Table 2 as well as with other MD results, namely $61.32 \text{ N}\cdot\text{m}^{-1}$ and 0.1725 along zigzag direction [53], and $38.64 \text{ N}\cdot\text{m}^{-1}$ and 0.156 along the armchair one [47].

Figure 3b and c display the stress-strain curves of SiC and SiGe sheets under uniaxial tensile loading along the armchair and zigzag directions at room temperature. When increasing the applied strain, the stress increases monotonically in the elastic loading stage. Then, it abruptly drops at the yielding points ϵ , listed in Table 2, indicating the absence of any plastic stage. Consequently, the Si-based materials SiC and SiGe exhibit brittle fracture under tension deformation. In the zigzag direction, the fracture strengths of SiC are around 58% and 66% smaller than those of graphene monolayer and boron-nitride (BN) sheets [39, 40], respectively, and they are about 54% and 52% lower along the armchair axis, respectively. However, SiC exhibits a higher magnitude of fracture strength compared to other compound materials such as GaN and InN [40] and with respect to its counterpart SiGe that shows 62% and 47% smaller fracture strengths along zigzag and armchair directions respectively. It follows that the mechanical properties of SiC material coupled to high temperature offer new possibilities for MEMS devices [54, 55], while SiGe is promising for the manufacture of strained-silicon films/ribbons in microelectronic devices [56].

For the SiC and SiGe sheets, the Young, bulk, and shear moduli are also determined in Table 2. The moduli calculated by our approach are comparable with the ones estimated by DFT calculations [35, 37]. Moreover, all elastic parameters exhibit higher values along a zigzag direction relative to the armchair one which is in good agreement with a previous study on stanene, silicene, and germanene sheets [57, 58]. Notice also that pure graphene is stiffer and less flexible than the SiC monolayer and also with respect to SiGe sheet that is less stiffer and more flexible. Furthermore, the fracture strain in SiGe is independent to strain directions in contrast to the two other sheets where it is affected by the loading axis.

Under uniaxial loading at different strains, the value of lattice parameters increases as the strain increases. It follows that d_{C-C} , d_{Si-C} , and d_{Si-Ge} augment as displayed in Fig. 4. More precisely, the bond length of Si-C stretches to

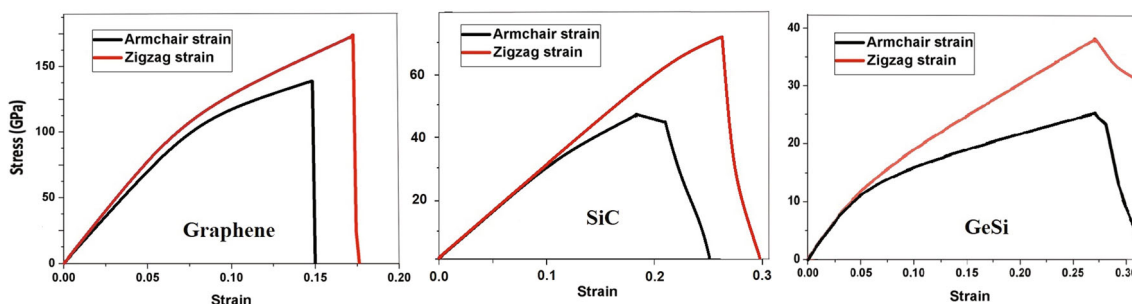
**Fig. 3** Stress-strain curves under uniaxial tension along armchair and zigzag directions at room temperature for graphene sheet, SiC hybrid, and SiGe monolayer

Table 2 Interatomic distances d in ($\text{\AA}$), Young's modulus Υ (N/m), strength σ (N/m), fracture strain ε , Bulk B and shear G modulus in (N/m) of the three monolayers along both armchair (AC) and zigzag (ZZ) orientations

Sheet	References	Υ	σ	ε	G	B
Graphene	DFT & MD [46]	320	32–34 (ZZ) (AC)	39–45	22 (ZZ) 84 (AC)	200
	MDFEM with optimized Tersoff potential [39]	358 (ZZ) 350 (AC) 354 (AV)	40 (ZZ) 48.65 (AV)	0.20 (ZZ) 0.19 (AV)	—	—
	Experiments [52]	340 $\pm$ 50	—	—	—	—
	Current study	355 (ZZ) 348 (AC) 351 (AV)	58.33 (ZZ) 52.36 (AV)	0.1725 (ZZ) 0.1613 (AV)	140	238
SiC	DFT [28]	—	—	—	—	—
	DFT [36]	163.5	—	—	62.9	—
	DFT [37]	165.8	—	—	64.2	117.4
	MDFEM with Tersoff-like potential. [40]	174 (ZZ) 172.5 (AV)	20.7 (ZZ) 19.05 (AV)	0.248 (ZZ) 0.22 (AV)	—	—
	MD. [39]	179.6 (ZZ) 176.5 (AV)	20.5 (ZZ) 19.05 (AV)	0.228 (ZZ) 0.201 (AV)	—	—
	Current study	163.43 (ZZ) (AC) 163.315 (AV)	14.3 (ZZ) 11.79 (AV)	0.1725 (ZZ) 0.16 (AV)	59.04	131.93
SiGe	DFT [38]	—	$\approx$ 4–6	0.16	—	—
	DFT [35]	58.64	—	—	—	—
	Current study	22.62 (ZZ) 22.605 (AV)	9.55 (ZZ) 7.98 (AV)	0.27	6.37	50.51

The Average (AV) is also given

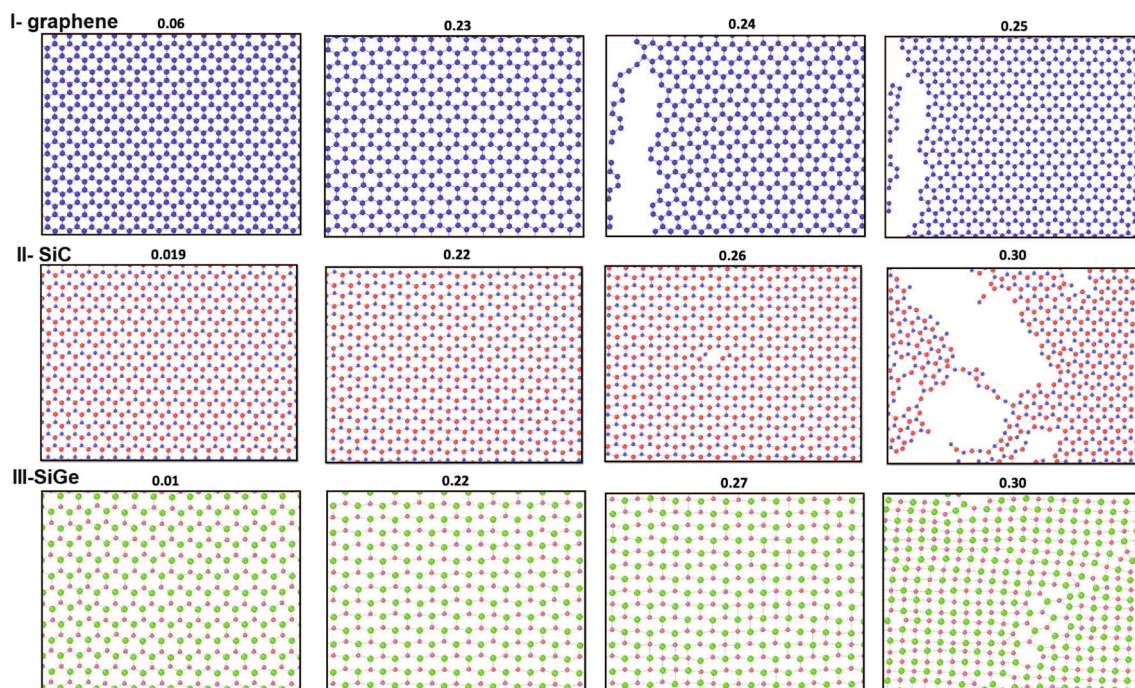


Fig. 4 Illustration of graphene, SiC, and SiGe deformation under uniaxial zigzag loading at temperature 300K and strain rate of 5×10^{-3} , 7×10^{-2} , and $3 \times 10^{-2} \text{Ps}^{-1}$, respectively

2.22 Å in the interval of strain [0–0.3] while the interatomic distances in SiGe and graphene stretch to 2.81 Å and 1.84 Å in the interval of strain [0–0.3] and [0–0.25], respectively. Furthermore, one can see that for SiC and graphene, the void of nucleation occurs at failure stress corresponding to $\varepsilon=0.26$ and 0.23, respectively, and the subsequent failure appears at a significantly close strain level. As shown in Fig. 4, the SiC and graphene sheets are divided into two portions that are connected together only by a chain of Si-C and C-C, respectively. For SiGe, the system struggles to conserve its structure unbroken with a bond length of 2.81 Å up to $\varepsilon=0.27$. Notice also that SiGe undergoes a sort of phase transition under strain from hexagonal to rectangular-like structure. Then, a soft failure with bond breaking occurs at close strain level.

We deduce that under the uniaxial loading, the systems show a stretching of their atomic bonds, resulting in the formation of rings, voids, and chemical defects (pentagon and triangles). The crystalline skeleton becomes less tied; therefore, it loses its rigidity.

Temperature effect

The effect of temperature is carried out for the large range from 100 to 800 K. For a strain rate of 0.03Ps^{-1} and 0.07Ps^{-1} for the two hybrids SiC and GeSi respectively, and 0.005Ps^{-1} for graphene, the calculations of stress in term of

strain along zigzag and armchair directions give the fracture strength and its corresponding strain displayed in Fig. 5.

Both the ultimate fracture stress and strain decrease as the temperature increases. More precisely, below room temperature, at 100 K, the maximal stress occurs at the strains of 17%, 26%, and 29% for graphene, SiC, and SiGe monolayers, respectively, in the zigzag direction. Along the armchair axis, it is about 16.5%, 18%, and 30%, respectively. At the highest temperature $T=800 \text{ K}$, the fracture occurs at 15.7%, and 13% in SiC sheet, and coincides with the strain of 22.5% and 18% under zigzag and armchair loadings, respectively for the hybrid SiGe. Graphene exhibits a fracture strain about 15% and 12.5% along the zigzag and the armchair directions at $T=600 \text{ K}$. It follows that the materials show an earlier fracture at higher temperatures due to the lengths of some chemical bonds which experience larger fluctuations and reach the critical bond length then break. Besides, the decrease of fractures is more considerable along the armchair direction than the zigzag one. One can explain this by the fact that opposite to the armchair deformation, the zigzag direction is more resilient to the applied strain owing to the orientation of the atoms bonds that are not parallel to the loading direction. Consequently, the zigzag strain can withstand more before fracture, resulting in a higher ultimate strain. Notice also that the fracture pattern is brittle in the three materials as indicated through the absence of plastic stage.

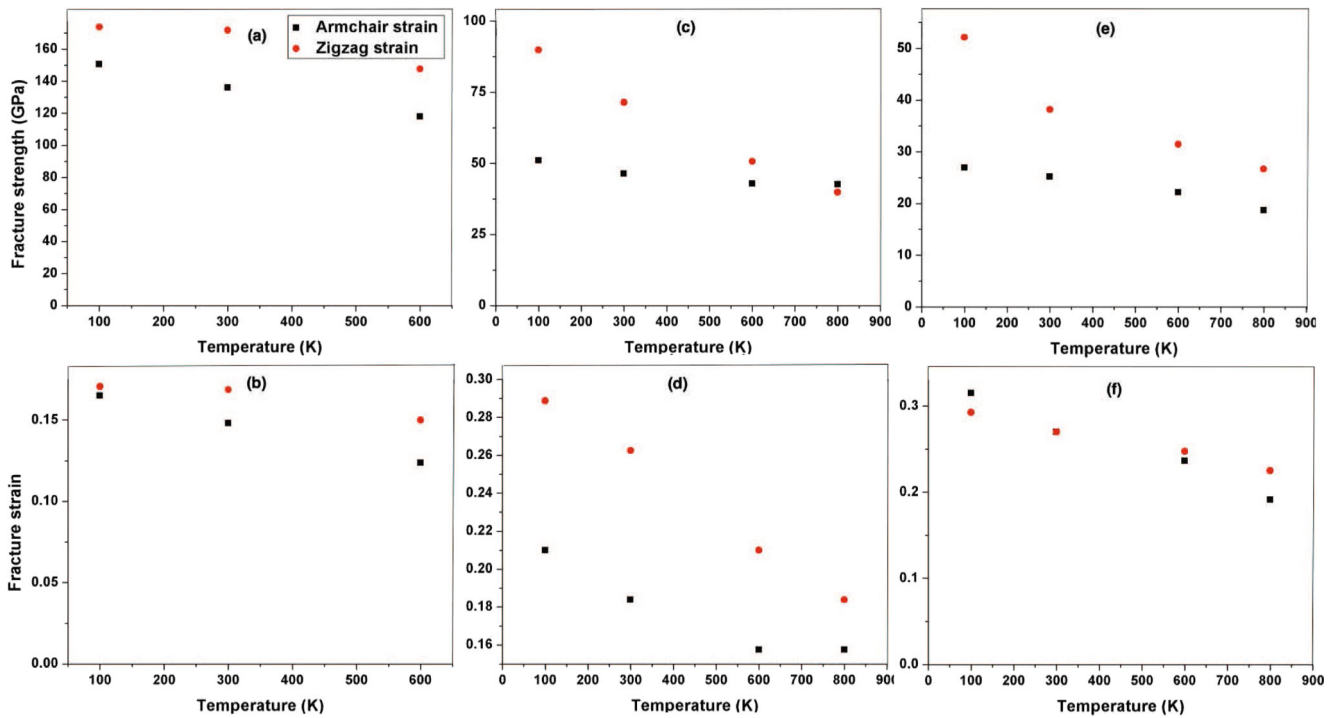


Fig. 5 Effect of temperature on fracture strength and fracture strain along zigzag and armchair directions, respectively for the cases of **a, b** graphene, **c, d** SiC and **e, f** SiGe sheets

Strain rate effect

Figure 6 shows the effect of strain rate on the mechanical properties of SiC and SiGe sheets. In the strain rate interval $[0.01, 0.09] \text{ Ps}^{-1}$, the fracture strength and the fracture strain slightly increase with the increases of strain rate and

follow almost a general trend. Due to the fact that at a lower strain rate, the atoms get more time to the thermal fluctuations, increasing the chance to overcome the energy barrier to break bonds at a lower strength. However, the examination of the effect of temperature on both the fracture strength and strain shows that the honeycomb structures

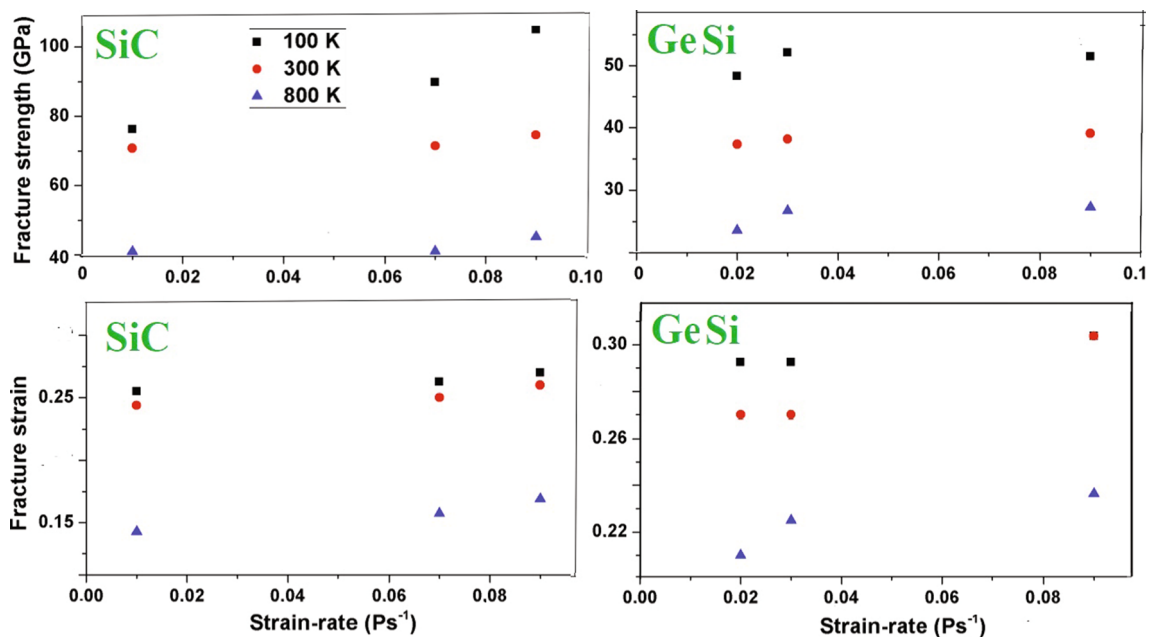


Fig. 6 Variation of the fracture strength and the fracture strain of SiC and SiGe sheets, respectively, with strain rate at different temperatures

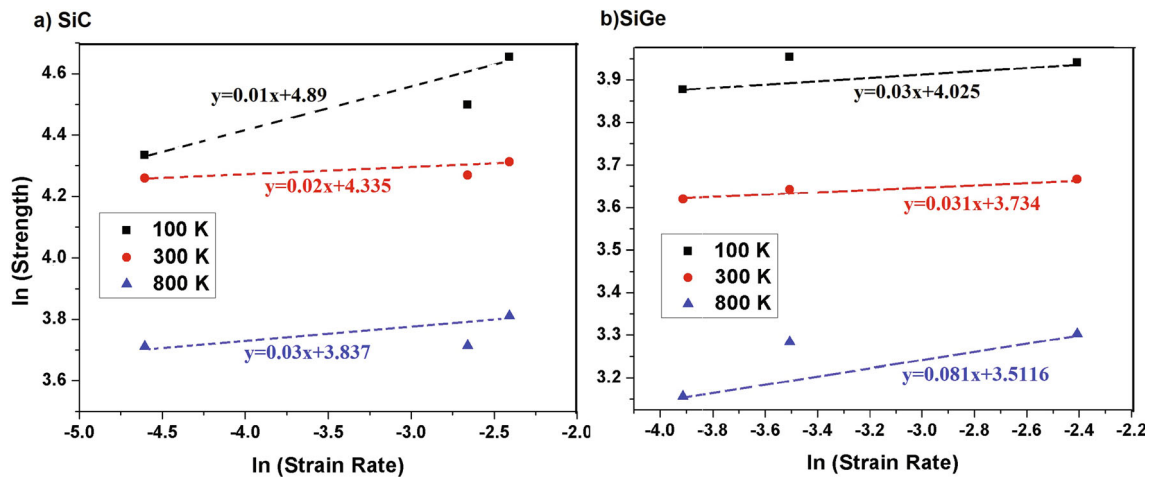


Fig. 7 Fracture strength in terms of strain rate for **a** SiC and **b** SiGe sheets at different temperatures. Results are shown in logarithmic scale

are more sensitive to the temperature than the strain rate.

At a constant temperature, the fracture stress σ is related to the strain rate $\dot{\epsilon}$ via the relation $\sigma = C \dot{\epsilon}^m$, where m is labeled the strain rate sensitivity that can be obtained from the slope of the plot of $\ln(\sigma)$ in terms of $\ln(\dot{\epsilon})$, as shown in Fig. 7. The parameter m measures how much sensitive the material is to strain rate. At a low temperature, the small value of m indicates that the materials are less sensitive to strain rate. It is obvious from Fig. 7 that the temperature influences strongly the strain rate sensitivity (m) that increases significantly with T varying from 100 K to room temperature for both the SiC and SiGe sheets. Therefore, the fracture stress of SiC and SiGe is less sensitive to strain rate at a temperature below 300 K. This can be attributed to the weaker thermal vibration of atoms in SiC and SiGe sheets at a low temperature.

Finally, one can deduce that increasing the strain rate leads to a rupture bond in the systems. However when increasing the temperature, the melting phase of the hybrids occurs from solid to liquid phase.

Vacancy defects

In what follows, we study the mechanical properties of mono-vacancy defective graphene, SiC and SiGe sheets. At room temperature, an uniaxial loading along the armchair direction with strain rate of 0.005, 0.07, and 0.03 Ps^{-1} is considered for defect concentration ranging from 0.5 to 5%. In Fig. 8, we plot results for concentration of vacancy up to 2% since the results on the fracture strain and fracture strength are similar for higher vacancy concentration, up to 5% in good agreement with [47].

Fracture strength and fracture strain of the hexagonal defected systems start decreasing with increasing percentage of defects as displayed in Fig. 8. At 0.5%, the fracture strength (strain) of SiC and SiGe hybrids shows decreases of 17.19% (24.15%) and 8.25% (13.04%), respectively, with respect to their pristine counterparts reported in the previous section and pure graphene [47]. The reduction of the fracture strength of graphene, SiC, and SiGe sheets is more important at 1.5% concentration; it is 23.49, 36.83, and 33.28 %, respectively, relative to their pristine counterparts.

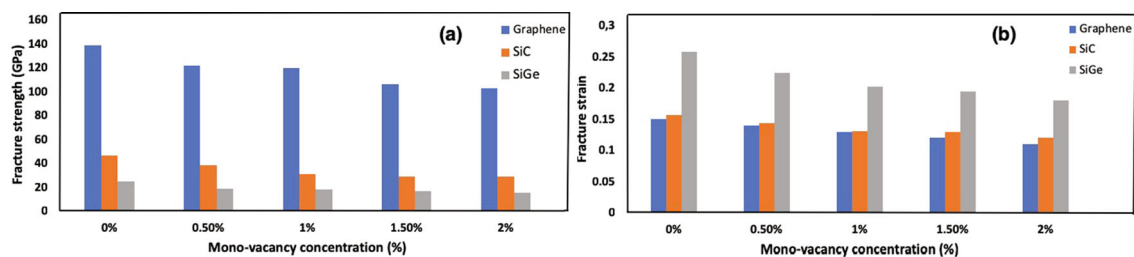


Fig. 8 **a** Fracture strength and **b** fracture strain of defective sheets along the armchair direction

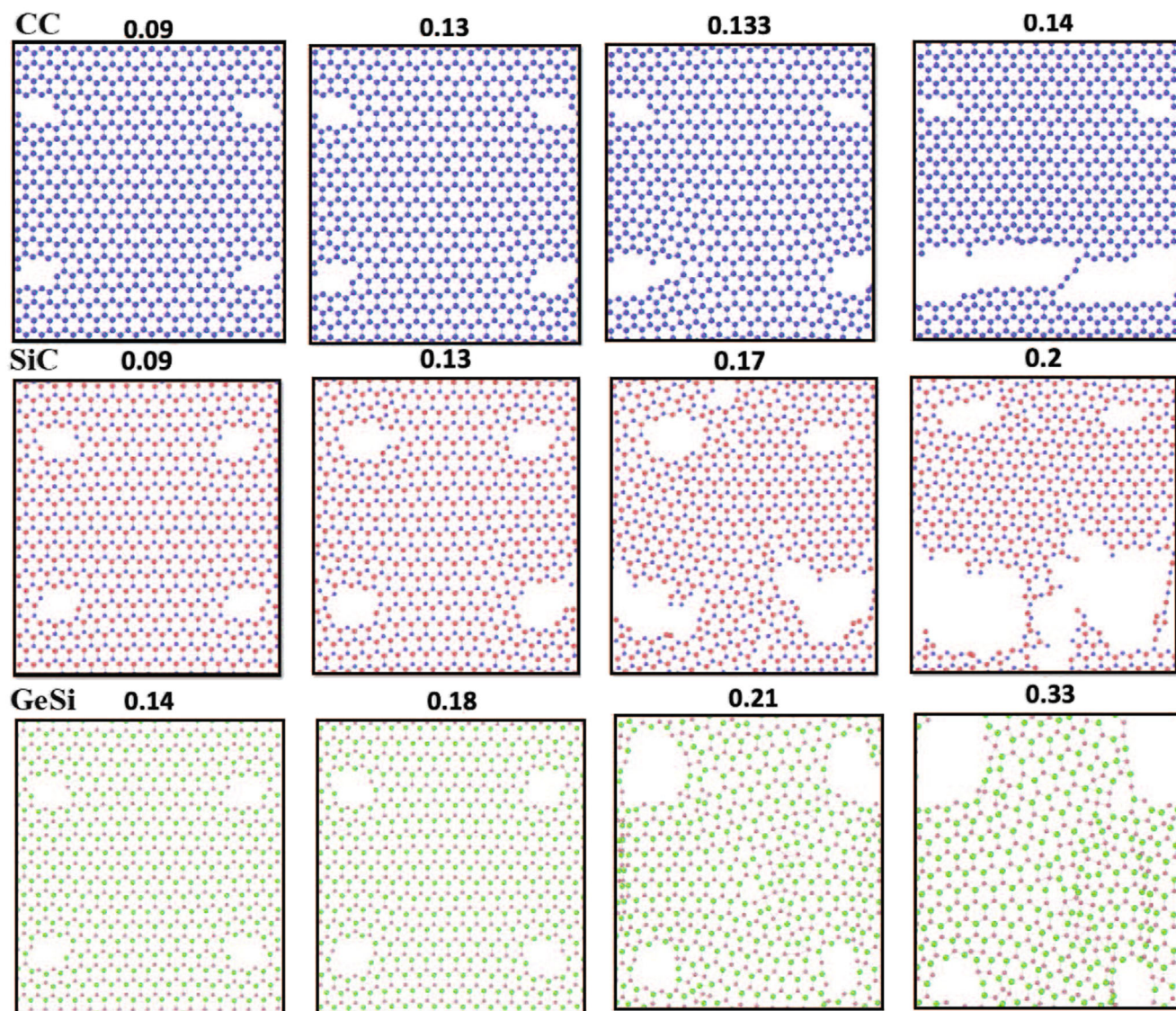


Fig. 9 Deformation of graphene, SiC, and SiGe sheets with 2% mono-vacancy concentration under uniaxial armchair loading at temperature 300 K and strain rates of 0.005, 0.07, and 0.03 Ps^{-1} , respectively

Notice that the trends of observations for armchair loading are similar to the case of zigzag direction.

Compared with SiC and SiGe sheets, Fig. 8 shows that the fracture strength of graphene is higher while its fracture strain is lower. It follows that with the increase of defect concentration, graphene is more flexible to deform but harder to break. Furthermore, Young's modulus of defective SiC and SiGe decreases with increasing degree of mono-vacancy. More precisely, Young's modulus decreases by 5.7 and 15.1 N/m for 0.5% and 2% mono-vacancy defected SiC with respect to the pristine sheet. However, decreases of 2.75 and 4.7 N/m, observed for the Young modulus of the defective SiGe with regard to its pristine counterpart, are less significant than the one reported for defected SiC hybrid.

Figure 9 shows the atomic configuration of the defective graphene, SiC, and SiGe with 2% mono-vacancy concentration at several moments. A general analysis of the snapshots of CC, SiC, and SiGe indicates that the voids are initiated around the vacancy and as the deformation increases the fracture initiates from two vacancies and propagates horizontally along the direction that is perpendicular to the applied loading direction. It follows that the point defects reduce the values of fracture strength and fracture strain but did not affect the brittle behavior of the sheets as provided in Fig. 4. More precisely, at the strain of $\varepsilon=0.09$ and 0.14, one can observe that some bond lengths at the edge of vacancy and parallel to loading direction stretch to reach 1.7, 2.03, and 2.40 Å, respectively, for the three hybrid sheets. The stress concentration occurs around the vacancy, resulting in

that the bonds in the defected area may break much earlier during the deformation. The C–C and Si–C bonds around the vacancy defect are broken stochastically, due to the high atomic fluctuation that overcomes the coherent force, performing a chaotic structure and an increase in the potential energy of the structure. For SiGe, the stretched bonds destroyed the structure of the defect, leading to formed rings by connecting the dangling atoms left from breaking the bonds. As the strain further increases, the bonds display successive rupture resulting in the void continues to propagate perpendicular to the loading direction. Defective SiGe could endure more tensile strain compared to defect-induced SiC and graphene. This can be attributed to the strong bond, which hinders the void to propagate at an earlier stage. It is also worthy to mention that graphene is more sensitive to defects since a few concentrations substantially weakened its performance.

Conclusion

In summary, the mechanical properties of pristine and defective hexagonal SiC and SiGe sheets are investigated using molecular dynamics simulations to provide deeper insights into the molecular mechanism of deformation of these 2D hybrid materials. With respect to the pure and defective SiGe monolayer, the SiC sheet exhibits higher Young's modulus and fracture values, both of which decrease with temperature, while the strain rate improves them. Furthermore, the effect of temperature is more significant compared to the strain rate. The analysis of the fracture process reveals a brittle rupture behavior for both pristine and defective hybrids. The defects' concentration also influences the results and discloses a lowering by 13.48–31.15 GPa and 6.1–9.64 GPa for the SiC and SiGe sheets' fracture strength, respectively, at 0.5 to 2% ratio. It is also shown that as the deformation increases, the voids start from the vacancies and spread horizontally resulting in brittle materials. Finally, the present findings provide a comprehensive data of the influence of temperature and strain on the structural and elastic properties of 2D hexagonal hybrids that may help in several nanomechanical applications.

Acknowledgements They also thank the LPHE-MS, Faculty of Sciences, Mohammed V University in Rabat, Morocco, for technical support through computer facilities, where all the calculations have been performed.

Funding The authors received financial support from “Académie Hassan II des Sciences et Techniques”-Morocco.

Author contribution K. Sadki: conceptualization, investigation, methodology, visualization, writing. M. Saaoud: conceptualization, investigation, methodology, visualization, writing. L. B. Drissi: conceptualization, investigation, methodology, visualization, writing (review and editing)

Data availability The data that support the findings of this study are available within the article.

Declarations

Conflict of interest The authors declare no competing interests.

References

- Novoselov KS, Geim AK, Morozov SV, Jiang D, Zhang Y, Dubonos SV, Grigorieva IV, Firsov AA (2004) Electric field effect in atomically thin carbon films. *science* 306.5696:666–669
- Wang H, Yang Y, Liang Y, Robinson JT, Li Y, Jackson A, Cui Y, Dai H (2011) Graphene-wrapped sulfur particles as a rechargeable lithium-sulfur battery cathode material with high capacity and cycling stability. *Nano Lett* 11.7:2644–2647
- Xiao J, Mei D, Li X, Xu W, Wang D, Graff GL, Bennett WD, Nie Z, Saraf LV, Aksay IA, Liu J, Zhang J (2011) Hierarchically porous graphene as a lithium battery electrode. *Nano Lett* 11.11:5071–5078
- Xiang H, Zhang K, Ji G, Lee JY, Zou C, Chen X, Wu J (2011) Graphene/nanosized silicon composites for lithium battery anodes with improved cycling stability. *Carbon* 49.5:1787–1796
- Li X, Zhu Y, Cai W, Borysiak M, Han B, Chen D, Piner RD, Colombo L, Ruoff RS (2009) Transfer of large-area graphene films for high-performance transparent conductive electrodes. *Nano Lett* 9.12:4359–4363
- Meric I, Han MY, Young AF, Ozyilmaz B, Kim P, Shepard KL (2008) Current saturation in zero-bandgap, top-gated graphene field-effect transistors. *Nat Nanotechnol* 11(654):3
- Xia F, Farmer DB, Lin Y, Avouris P (2010) Graphene field-effect transistors with high on/off current ratio and large transport band gap at room temperature. *Nano Lett* 10(2):715–718
- Somani PR, Somani SP, Umeno M (2006) Planar nano-graphenes from camphor by CVD. *Chem Phys Lett* 430:56–59
- Banhart F, Kotakoski J, Krasheninnikov AV (2010) Structural defects in graphene. *ACS Nano* 5:26–41
- Changgu L, Xiaoding W, Kysar Jeffrey W, James H (2008) Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *Science* 321(5887):385–388
- Cahangirov S, Topsakal M, Aktürk E, Sahin H, Ciraci S (2009) Two- and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium. *Phys Rev Lett* 23(236804):102
- Vogt P, Padova PD, Quaresima C, Avila J, Frantzeskakis E, Asensio MC, Resta A, Ealet B, Lay GL (2012) Silicene: compelling experimental evidence for graphenelike two-dimensional silicon. *Phys Rev Lett* 15(155501):108
- Fleurence A, Friedlein R, Ozaki T, Kawai H, Wang Y, Takamura YY (2012) Experimental evidence for epitaxial silicene on diboride thin films. *Phys Rev Lett* 24(245501):108
- Meng L, Wang Y, Zhang L, Du S, Wu R, Li L, Zhang Y, Li G, Zhou H, Hofer WA, Gao HJ (2013) Buckled silicene formation on Ir (111). *Nano Lett* 13.2:685–690
- Li L, Lu SZ, Pan J, Qin Z, Wang Y, Wang Y, Cao GY, Du S, Cao HJ (2014) Buckled germanene formation on Pt (111). *Adv Mater* 26.28:4820–4824
- Derivaz M, Dentel D, Stephan R, Hanf MC, Mehdaoui A, Sonnet P, Pirri C (2015) Continuous germanene layer on Al (111). *Nano Lett* 15.4:2510–2516
- Gamboa A, Vignoles GL, Leyssale JM (2015) On the prediction of graphene elastic properties with reactive empirical bond order potentials. *Carbon* 89:176–187
- Wang P, Qiao G, Hou D, Jin Z, Wang M, Zhang J, Sun G (2020) Functionalization enhancement interfacial bonding strength bet-

- ween graphene sheets and calcium silicate hydrate: Insights from molecular dynamics simulation. *Constr Build Mater* 261:120500
19. Zhao S, Xue J (2013) Mechanical properties of hybrid graphene and hexagonal boron nitride sheets as revealed by molecular dynamic simulations. *J Phys D Appl Phys* 46(135303):13
 20. Saaoud M, Sadki K, Drissi LB, Djeflal F (2020) Mechanical response of layered borophene: impact of strain, temperature, vacancies and intercalation. *Eur Phys J Appl Phys* 3(30401):90
 21. Kaloni TP, Cheng YC, Schwingenschlögl U (2013) Hole doped Dirac states in silicene by biaxial tensile strain. *J Appl Phys* 10(104305):113
 22. Pei QX, Sha ZD, Zhang YY, Zhang YW (2014) Effects of temperature and strain rate on the mechanical properties of silicene. *J Appl Phys* 2(023519):115
 23. Zhou Y, Zheng H, Qiu Y, Zou X, Huang J (2020) A molecular dynamics study on the structure, interfaces, mechanical properties, and mechanisms of a calcium silicate Hydrate/2D-Silica nanocomposite. *Front Mater* 7:127
 24. Mojmunder S, Amin AA, Islam MM (2015) Mechanical properties of stanene under uniaxial and biaxial loading: a molecular dynamics study. *J Appl Phys* 12(124305):118
 25. Le MQ (2018) Fracture of monolayer germanene: a molecular dynamics study. *Int J Modern Phys B* 22(1850241):32
 26. Pacilè D., Meyer JC, Girit ÇÖ, Zett A (2008) The two-dimensional phase of boron nitride: Few-atomic-layer sheets and suspended membranes. *Appl Phys Lett* 13(133107):92
 27. Lin Y, Connell JW (2012) Advances in 2D boron nitride nanostructures: nanosheets, nanoribbons, nanomeshes, and hybrids with graphene. *Nanoscale* 4:22:6908–6939
 28. Drissi LB, Saidi EH, Bousmina M, Fassi-Fehri O (2012) DFT Investigations of the hydrogenation effect on silicene/graphene hybrids. *J Phys Condens Matter* 48(485502):24
 29. Drissi LB, Ramadan FZ (2015) Many body effects study of electronic & optical properties of silicene-graphene hybrid. *Physica E: Low-dimension Syst Nanostruct* 68:38–41
 30. Langueur H, Kassali K, Lebga N (2013) Density Functional Study of Structural, Mechanic, Thermodynamic and Dynamic Properties of SiGe Alloys. *J Comput Theor Nanosci* 10.1:86–94
 31. Ataca C, Sahin H, Ciraci S (2012) Stable, single-layer MX₂ transition-metal oxides and dichalcogenides in a honeycomb-like structure. *J Phys Chem C* 116.16:8983–8999
 32. Chang TR, Lin H, Jeng HT, Bansil A (2014) Thickness dependence of spin polarization and electronic structure of ultrathin films of MoS₂ and related transition-metal dichalcogenides. *Sci Rep* 4:6270
 33. Wang Y, Fan X, Sun J (2009) Hydrothermal synthesis of phosphate-mediated ZnO nanosheets. *Mater Lett* 63.3-4:350–352
 34. Wu J, Shen X, Jiang L, Wang K, Chen K (2010) Solvothermal synthesis and characterization of sandwich-like graphene/ZnO nanocomposites. *Appl Surf Sci* 256.9:2826–2830
 35. Shi J, Gao Y, Wang XL, Yun SN (2017) Electronic, Elastic and Piezoelectric Properties of Two-Dimensional group-IV Buckled Monolayers. *Chin Phys Lett* 8(087701):34
 36. Andrew RC, Mapasha RE, Ukpong AM, Chetty N (2012) Mechanical properties of graphene and boronitrene. *Phys Rev B* 12(125428):85
 37. Drissi LB, Sadki K (2015) Elastic properties and sound velocities of silicene/graphene hybrids. *Mech Mater* 89:151–158
 38. Jamdagni P, Kumar A, Thakur A, Pandey R, Ahluwalia PK (2015) Stability and electronic properties of SiGe-based 2D layered structures. *Mater Res Express* 1(016301):2
 39. Le MQ (2014) Atomistic study on the tensile properties of hexagonal AlN, BN, GaN, InN and SiC sheets. *J Comput Theor Nanosci* 11.6:1458–1464
 40. Le MQ, Nguyen DT (2014) Atomistic simulations of pristine and defective hexagonal BN and SiC sheets under uniaxial tension. *Mater Sci Eng A* 615:481–488
 41. Sadki K, Zanane FZ, Ouahman M, Drissi LB (2020) Molecular dynamics study of pristine and defective hexagonal BN, SiC and SiGe monolayers. *Mater Chem Phys* 242:122474
 42. Sahin H, Cahangirov S, Topsakal M, Bekaroglu E, Aktürk E., Senger RT, Ciraci S (2009) Monolayer honeycomb structures of group-IV elements and III-V binary compounds: First-principles calculations. *Phys Rev B* 80(155453):15
 43. Sadki K, Kourra MH, Drissi LB (2019) Non linear and thermoelastic behaviours of group-IV hybrid 2D nanosheets. *Superlatt Microstruct*:106172
 44. Plimpton S (1995) Computational limits of classical molecular dynamics simulations. *Comput Mater Sci* 4.4:361–364
 45. Tersoff J, chemistry Modelingsolid-state (1989) Interatomic potentials for multicomponent systems. *Phys Rev B* 39(5566):8
 46. Kalosakas G, Lathiotakis NN, Galiotis C, Papagelis K (2013) In-plane force fields and elastic properties of graphene. *J Appl Phys* 113(134307):13
 47. Rajasekaran G, Kumar R, Parashar A (2016) Tersoff potential with improved accuracy for simulating graphene in molecular dynamics environment. *Mater Res Express* 3(035011):3
 48. Thomas S, Ajith KM, Lee SU, Valsakumar MC (2018) Assessment of the mechanical properties of monolayer graphene using the energy and strain-fluctuation methods. *RSC Adv* 8(48):27283–27292
 49. Thomas S, Ajith KM (2014) Molecular dynamics simulation of the thermo-mechanical properties of monolayer graphene sheet. *Procedia Mater Sci* 5:489–498
 50. Wang MC, Yan C, Ma L, Hu N, Chen MW (2012) Effect of defects on fracture strength of graphene sheets. *Comput Mater Sci* 54:236–239
 51. Sun X, Fu Z, Xia M, Xu Y (2014) Effects of vacancy defect on the tensile behavior of graphene. *Theor Appl Mech Lett* 4(051002):5
 52. Lee C, Wei X, Kysar JW, Hone J (2008) Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *Science* 321.5887:385–388
 53. Nayebi P, Zaminpayma E (2016) A molecular dynamic simulation study of mechanical properties of graphene-polythiophene composite with Reax force field. *Phys Lett A* 380.4:628–633
 54. Zawawi SA, Hamzah AA, Mohd-Yasin F, Majlis BY (2017) Mechanical performance of SiC based MEMS capacitive microphone for ultrasonic detection in harsh environment. *Nanoengineering: fabrication, Properties, Optics, and Devices XIV*. International Society for Optics and Photonics, pp 10354
 55. Phan HP, Qamar A, Dao DV, Dinh T, Wang L, Han J, Tanner P, Dimitrijević S, Nguyen NT (2015) Orientation dependence of the pseudo-Hall effect in p-type 3C–SiC four-terminal devices under mechanical stress. *RSC Adv* 5.69:56377–56381
 56. Qiu W, Ma LL, Wang HT, Liang RR, Zhao YC, Zhou Y (2018) Experimental Analyses on Multiscale Structural and Mechanical Properties of C-Si/GeSi/C-Si Materials. *Appl Sci* 8(2333):12
 57. Mortazavi B, Rahaman O, Makaremi M, Dianat A, Cuniberti G, Rabczuk T (2017) First-principles investigation of mechanical properties of silicene, germanene and stanene. *Physica E: Low-dimension Syst Nanostruct* 87:228–232
 58. Pei QX, Sha ZD, Zhang YY, Zhang YW (2014) Effects of temperature and strain rate on the mechanical properties of silicene. *J Appl Phys* 115(2):023519
 59. Zhou Y, Hou D, Geng G, Feng P, Yu J, Jiang J (2018) Insights into the interfacial strengthening mechanisms of calcium-silicate-hydrate/polymer nanocomposites. *Phys Chem Chem Phys* 20.12:8247–8266

2 Influence de défauts sur le comportement élastique

En général, à travers le processus de fabrication des matériaux bidimensionnels, l'apparition de divers défauts structuraux tels que des défauts ponctuels et des fissures devient inévitable en raison de l'environnement difficile pendant le processus de fabrication, et de l'exposition fréquente à des températures élevées. Il est donc nécessaire de se concentrer sur l'étude de l'effet de la taille et du comportement des pores et des fissures intentionnelles sur les propriétés mécaniques de nos matériaux hybrides bidimensionnels, non seulement pour prévoir et éviter les défaillances mécaniques, mais aussi pour trouver un moyen d'exploiter ces défauts afin d'améliorer leurs propriétés mécaniques.

2.1 Défauts ponctuels

Nous commençons par étudier les propriétés mécaniques de nos matériaux 2D hybride du groupe IV : graphène, SiC et SiGe défectueuses par des lacunes. A température ambiante, une charge uniaxiale le long de la direction armchair est considérée pour une concentration de défauts allant de 0.5 à 5%. La distribution des lacunes est présentée dans la figure IV.11. Dans la Fig. IV.12, nous traçons les résultats pour une concentration de lacune jusqu'à 2% puisque les résultats sur la déformation et la résistance à la rupture sont similaires pour une concentration de lacune plus élevée, jusqu'à 5% en bon accord avec [107].

La résistance à la rupture et la déformation à la rupture des systèmes hexagonaux défectueux commencent à diminuer avec l'augmentation du pourcentage de défauts, comme le montre la figure IV.12. À 0.5 %, la résistance à la rupture (déformation) des hybrides SiC et SiGe présente des diminutions de 17.19 % (24.15 %) et 8.25 % (13.04%), respectivement, par rapport à leurs homologues purs rapportés dans la section précédente et au graphène pur [107]. La réduction de la résistance à la rupture des feuilles de graphène, de SiC et de SiGe est plus importante à une concentration de 1.5 % ; elle est de 23.49, 36.83 et 33.28 %, respectivement, par rapport à leurs homologues purs. Notez que les tendances des observations pour le chargement armchair sont similaires au cas de la direction en zigzag.

Comparé aux feuilles de SiC et de SiGe, la Fig. IV.12 montre que la résistance à la rupture du graphène est plus élevée alors que sa déformation à la rupture est plus faible. Il s'ensuit qu'avec l'augmentation de la concentration de défauts, le graphène est plus flexible pour se déformer mais plus difficile à casser. De plus, le module de Young du SiC et du SiGe défectueux diminue avec l'augmentation du degré de mono-lacune. Plus

2. Influence de défauts sur le comportement élastique

précisément, le module de Young diminue de 5,7 et 15,1 N/m pour les SiC défectueux à 0.5% et 2% de mono-lacune par rapport à la feuille pur. Cependant, les diminutions de 2.75 et 4.7 N/m, observées pour le module de Young du SiGe défectueux par rapport à son homologue pur, sont moins importantes que celle rapportée pour l'hybride SiC défectueux.

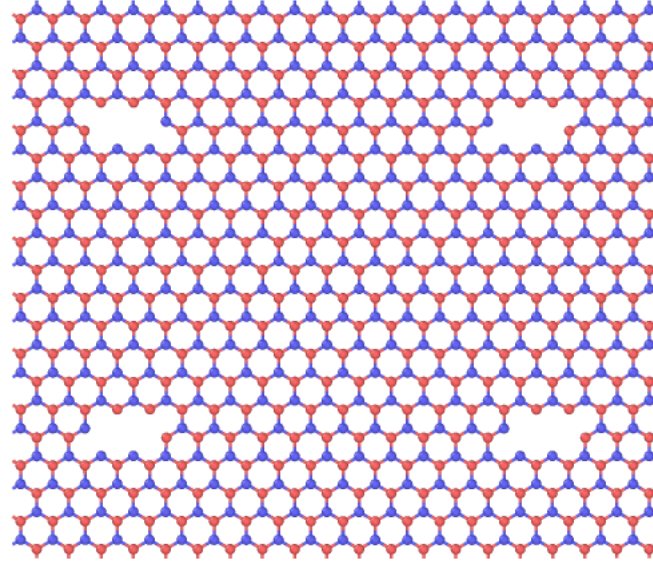


FIGURE IV.11 – Illustration d'un matériau hybride 2D du groupe IV, avec une concentration de 2 % de mono-lacune.

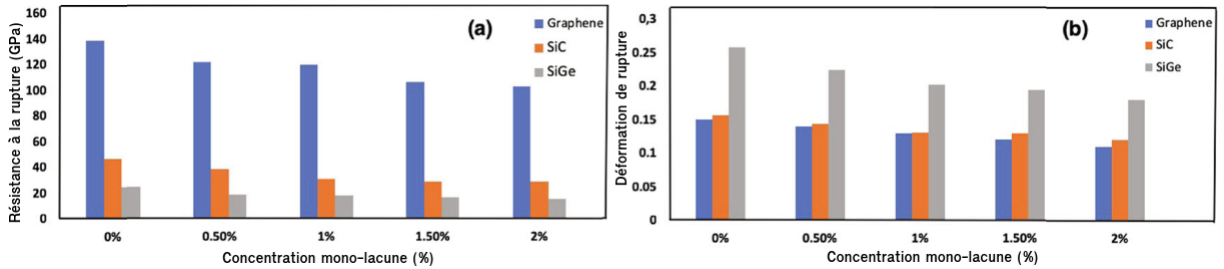


FIGURE IV.12 – a) Résistance à la rupture et b) Déformation à la rupture des feuilles défectueuses dans le sens armchair.

L'influence des défauts de lacunes sur la réponse mécanique du borophène multicouche est également étudiée. Les lacunes simples (SV) et les lacunes doubles (DV) sont créées en supprimant 0.5 à 2 % du total des atomes B de la supercellule. Les défauts DV2 et DV1 sont obtenus en supprimant deux atomes voisins le long de la direction y pour DV2 et le long de la direction diagonale pour DV1, tandis que la suppression

d'un atome du centre d'un hexagone dans la supercellule génère un défaut SV, comme illustré à la figure IV.13.

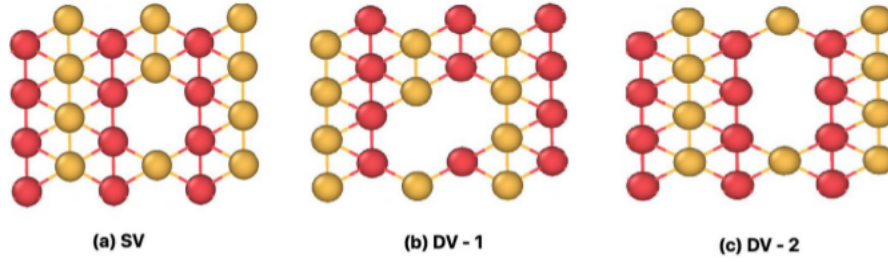


FIGURE IV.13 – Structure cristalline des défauts à simple lacune (SV) et à double lacune (DV) dans le borophène monocouche.

La figure IV.14 montre une baisse du module de Young (Υ) en augmentant les concentrations de défauts de lacunes. La valeur de Υ correspondant au borophène défectueux SV est intermédiaire entre celle des lacunes DV1 et DV2 à toutes les concentrations et dans les directions zigzag et armchair. Lorsque l'on augmente le nombre de couches, la valeur de Υ diminue. Il s'ensuit que parmi toutes les configurations du borophène multicouche défectueuses, DV-2 induit le module de Young le plus élevé le long de la direction armchair et le plus petit le long de l'axe en zigzag par rapport à DV-1 et SV. Une explication possible de ce résultat peut être l'orientation des défauts dans chaque feuille et leur position par rapport au plissement qui est le long de la direction zigzag.

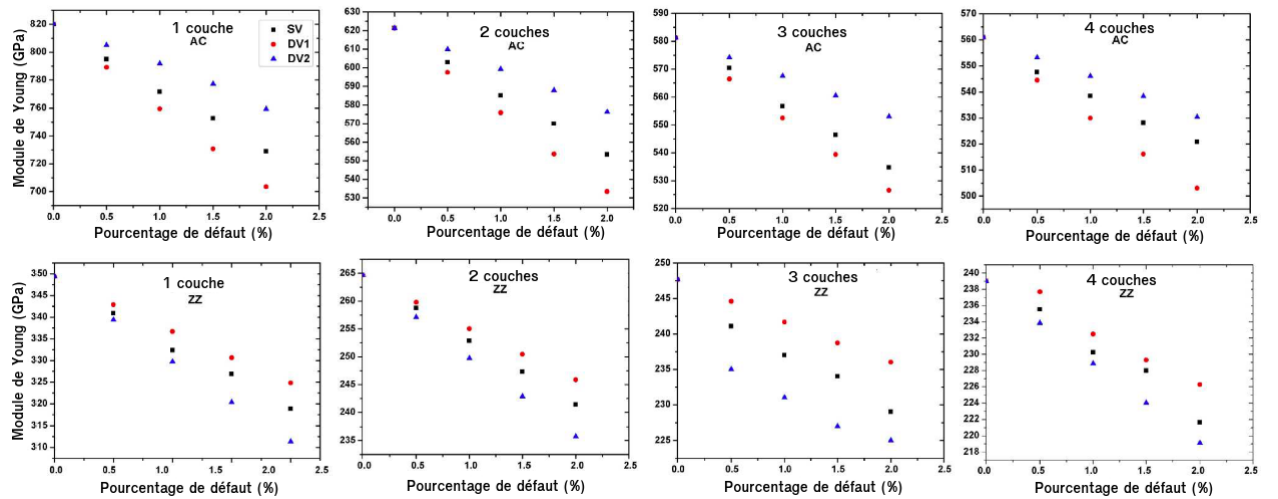


FIGURE IV.14 – Module de Young du borophène multicouche en fonction de la concentration des défauts de lacunes le long des directions zigzag et armchair.

2. Influence de défauts sur le comportement élastique

Comme le montre la figure IV.15, la résistance à la rupture la plus faible se trouve le long de l'axe armchair par rapport à l'axe zigzag pour les trois types de défauts de lacune. Il en résulte que les lacunes rendent borophène multicouche endurant une traction bien plus importante dans la direction armchair que celle en zigzag. De plus, pour chaque type de lacune, l'augmentation de sa concentration réduit la résistance à la rupture dans le borophène multicouche. Le défaut DV-2 conduit à la valeur la plus élevée (la plus faible) par rapport aux défauts SV et DV-1 le long de l'axe armchair (zigzag). Cela peut être attribué à la liaison longue (liaison courte) du borophène qui est perpendiculaire à la direction de chargement, à savoir la direction armchair (zigzag). Enfin, par rapport au borophène multicouche pur, l'augmentation du nombre de couches, à type de défaut fixe, diminue légèrement les valeurs de rupture, ce qui est en conformité avec le phosphore noir [282].

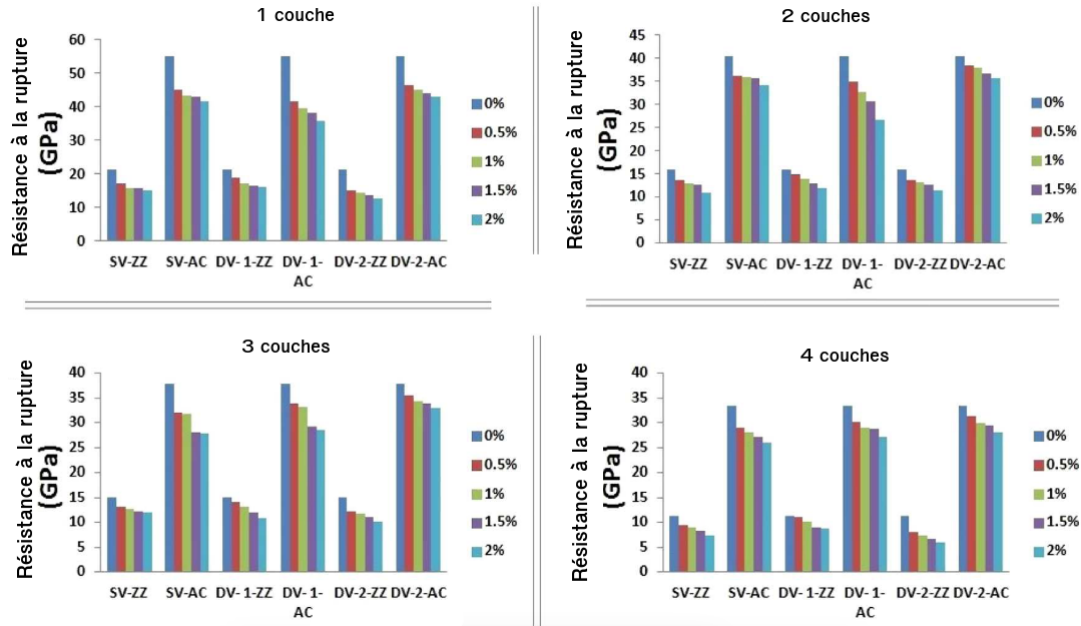


FIGURE IV.15 – Résistance à la rupture du borophène multicouche pur et défectueux en fonction des concentrations de défauts de lacune le long des directions armchair et zigzag.

L'oxyde de bore hexagonal 2D (BO) du groupe III-VI présente un comportement intéressant en présence de différents types de lacunes, qui sont des défauts mono- et bi-lacunes, disposés perpendiculairement à la direction de chargement. La résistance à la rupture par rapport au pourcentage de défauts pour la nanofeuille de BO défectueuse tracée à la Fig. IV.16 révèle que l'augmentation du taux de défauts s'accompagne d'une diminution de la résistance à la rupture.

Pour une mono-lacune de 0.1 % à 2 %, la réduction de la résistance à la rupture est d'environ 33.3 % le long de l'orientation en zigzag et de 34 % le long de l'axe armchair,

tandis qu'elle est d'environ 33.5 % et 37.3 % dans les orientations en zigzag et armchair, respectivement, pour le cas de la bi-lacune. Contrairement au chargement en zigzag où la diminution de la résistance à la rupture est assez insensible au type de défauts de lacunes, les bi-lacunes entraînent une diminution plus importante de la résistance à la rupture par rapport aux mono-lacunes le long de la direction armchair, comme illustré à la Fig.IV.16(b). Ce résultat est également observé dans le phosphorène [283]. Pour mettre en lumière ces variations, nous analysons l'effet de la largeur de la lacune m_i et b_i ($i = \text{zig, arm}$) présenté dans les figures IV.17-(a) et (b). Remarquez que b_{zig} est plus grand que m_{zig} tandis que b_{arm} est à peu près égal à m_{arm} . Lorsque la feuille de BO est soumise à une charge dans la direction armchair, la réduction de l'aire de la section transversale par une bi-lacune (b_{zig}) est plus importante que celle d'une mono-lacune (m_{zig}), ce qui explique la diminution plus importante du défaut de bi-lacune. D'autre part, lorsque le chargement est le long de la direction zigzag, nous avons donc observé une réduction presque identique de la résistance à la rupture pour les mono et bi lacunes puisque la réduction de la section transversale par une bi-lacune (b_{arm}) est identique à celle d'une mono-lacune (m_{arm}).

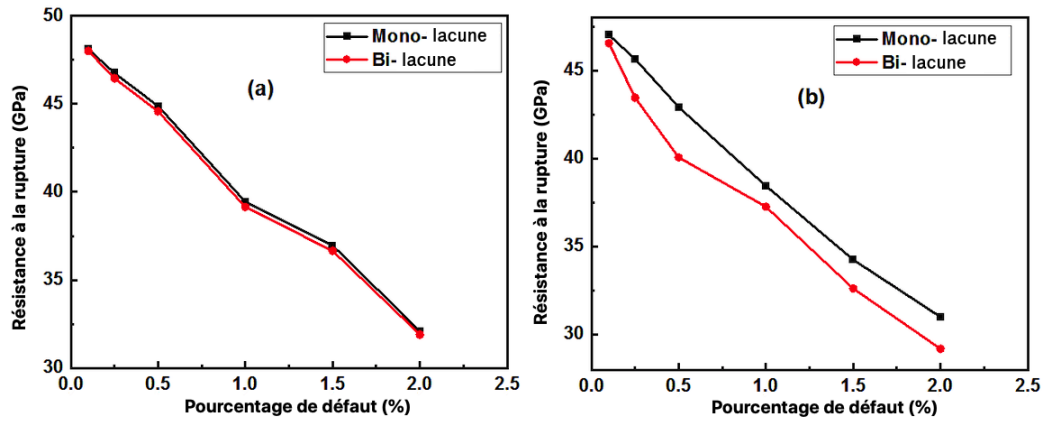


FIGURE IV.16 – Résistance à la rupture par rapport au pourcentage de défauts de mono-lacune et de bi-lacune pour le chargement le long de (a) la direction zigzag et (b) la direction armchair.

Liée à l'impact des défauts, la figure IV.18 a représenté la variation du module de Young en termes de pourcentage de défauts mono- et bi-lacunes. Le module de Young diminue à mesure que la concentration de défauts augmente. La réduction du module de Young pour une concentration de mono-lacunes (bi-lacunes) allant de 0.1 % à 2 % est de 2.23 % (2.37 %) et de 2.51 % (2.72 %), respectivement dans les directions armchair et zigzag. Il est à noter que les deux types de lacunes ont presque la même diminution avec une légère différence en faveur de la bi-lacune due à la formation de liaisons pendantes près des atomes éliminés. Selon [182, 284], le graphène et le 2D-SiC

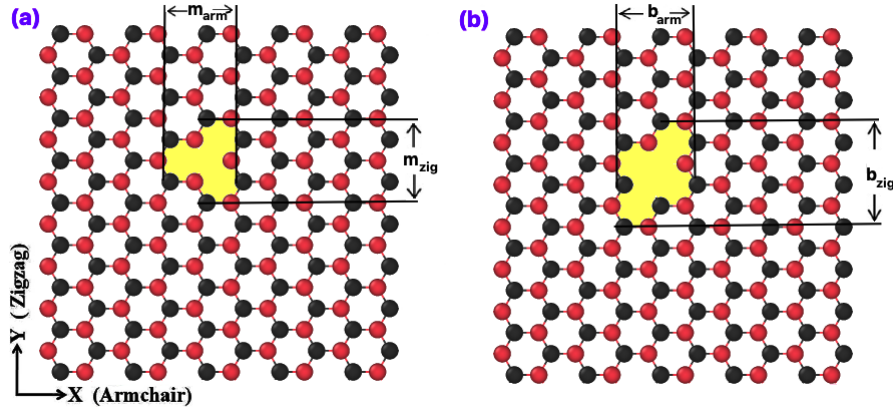


FIGURE IV.17 – (a) mono-lacune et (b) bi-lacune monocouche BO défectueuse, où m_{zig} et m_{arm} sont la largeur de défaut de la mono-lacune, tandis que b_{zig} et b_{arm} sont ceux correspondant à la bi-lacune.

montrent un effet significatif de la lacune unique par rapport à la bi-lacune en raison de la forte rupture de symétrie. Mais la présente étude rapporte un effet opposé pour la monocouche BO, qui peut être attribué à l'interaction entre les liaisons pendantes ou les instabilités chimiques, en raison des atomes manquants pour la structure atomique discrète de notre composé.

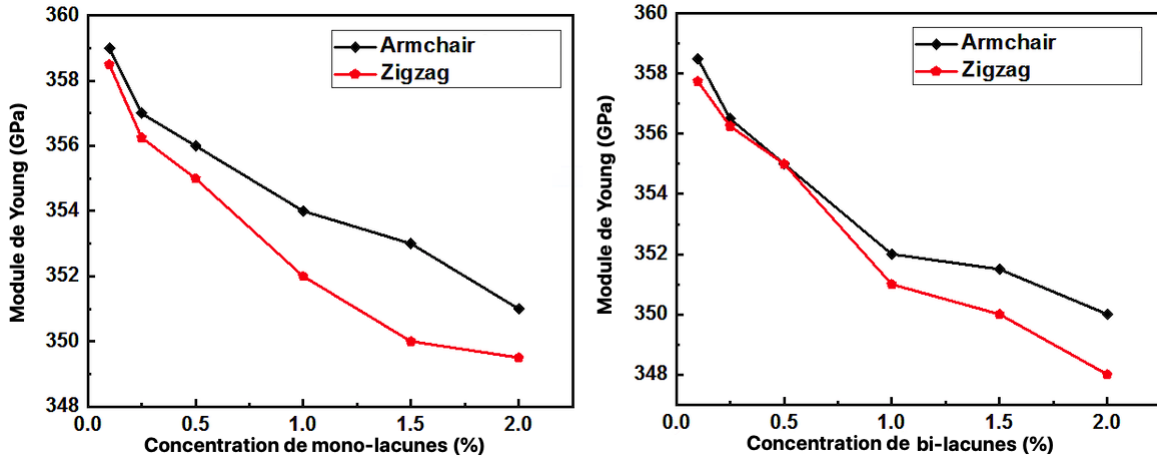


FIGURE IV.18 – Effets de la concentration des défauts (mono-lacune ou bi-lacune) sur le module de Young de la monocouche BO sous tension uniaxiale le long des orientations armchair et zigzag.

Enfin pour l'oxyde de bore 2D, l'énergie de formation des défauts, définie comme l'énergie nécessaire pour rompre les liaisons entre un atome dans la structure et ses atomes voisins les plus proches pour une suppression complète, de la mono-lacune et de la bi-lacune, est donnée dans l'équation (II.57) et affichée dans la figure IV.19. Notre découverte pour une mono-lacune (une fois O et une fois B) et une double

lacune est de 1.27(O) eV, 2.1(B) eV et 4.1 eV, respectivement. La différence d'énergie de formation constatée pour la mono-lacune entre les atomes B et O est principalement due à la différence d'électronégativité entre les deux atomes. Selon la valeur plus élevée de l'énergie de formation correspondant à la bi-lacune, on s'attend donc à ce que le type de défaut dominant dans la monocouche BO. Nous avons fait circuler le calcul jusqu'à 2% de défauts, la Fig. IV.19 montre la variation de l'énergie de formation en terme de pourcentage de défauts dans les deux types de lacunes. Il apparaît que l'énergie de formation augmente de manière monotone avec le taux de défauts, ce qui confirme sa forte sensibilité à la concentration de la lacune. Le présent résultat prédit les changements structuraux et les défauts dominants de notre matériau et révèle que l'élimination d'un seul atome nécessite beaucoup plus d'énergie que suppression d'une paire de BO, ce qui indique que la bi-lacune est le défaut le plus typique de la feuille de BO en bon accord avec [285, 286].

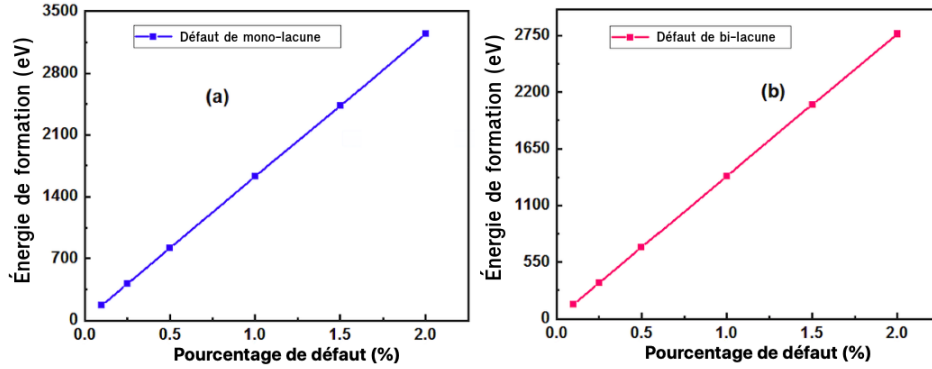


FIGURE IV.19 – Variation de l'énergie de formation en fonction de (a) la concentration de défauts mono-lacune et (b) bi-lacune dans une feuille de BO.

Un nanopore est un pore de taille nanométrique. Il peut, par exemple, être créé par un trou dans des matériaux synthétiques tels que le silicium ou le graphène. Dans ce paragraphe, nous étudions les effets de la taille des nanopores sur la contrainte ultime des nanofeuilles d'InTe, ce qui constitue la pierre angulaire de la section suivante. La figure IV.20 représente l'effet du diamètre des nanopores sur la contrainte de rupture d'une nanofeuille InTe contenant un pore central pour les directions de chargement en armchair et en zigzag. La taille du pore est variée pour déterminer son effet sur la feuille InTe. Il est évident sur la figure que l'augmentation du diamètre des nanopores réduit la contrainte de traction, ce qui suit une tendance similaire à celle du graphène nanoporeux, du MoS_2 et du borophène [60, 287, 288]. Cette diminution est également observée pour la déformation à la rupture correspondante. Ce phénomène est attendu dans une certaine mesure car une taille de pores plus élevée conduit à une plus grande

2. Influence de défauts sur le comportement élastique

surface, ce qui augmente la possibilité d'une rupture précoce du matériau. Nous observons que, pour le même diamètre de pore, la contrainte de rupture le long de la direction de chargement en armchair est plus faible que dans la direction de chargement en zigzag. La réduction de la contrainte de rupture dans la direction armchair et zigzag pour modifier le diamètre des pores de 1.3 nm à 5.3 nm est d'environ $\sim 40\%$ et d'environ $\sim 24\%$, respectivement. Ce type de phénomène est cohérent avec les études précédentes [60, 289] et également observé dans le cas de l'allongement de la fissure.

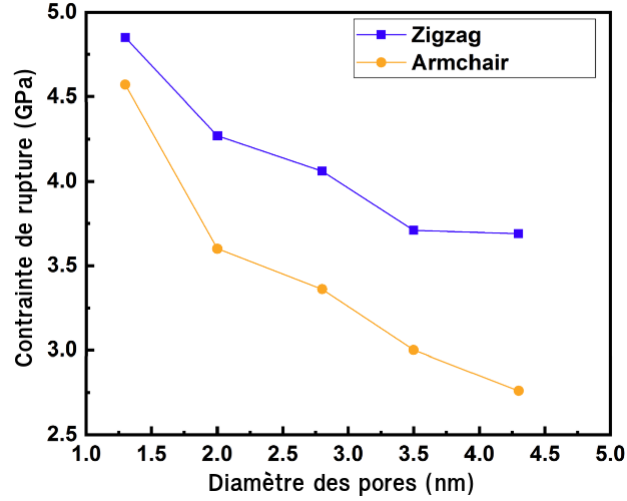


FIGURE IV.20 – Variations de la contrainte de rupture en fonction du diamètre des pores de la feuille BO sous tension uniaxiale selon les directions zigzag et armchair.

Le processus de déformation et la distribution des contraintes de la monocouche poreuse InTe à 300K le long du chargement directionnel en zigzag et armchair sont représentés sur la Fig. IV.21. Le schéma de propagation de la fracture dans tous les cas semble analogue à première vue. Au début, certaines liaisons sont rompues pour faciliter la formation de la pointe de la fissure, puis le même processus de déformation de la fissure suit (il sera montré plus tard), y compris que les liaisons dans la direction armchair (tension zigzag) résistent mieux à la rupture que celles dans la direction zigzag (tension armchair), ce qui justifie davantage nos résultats susmentionnés.

Nous concluons que le type de lacune, son emplacement, sa concentration et son orientation avec la direction de la charge ont une forte influence sur les propriétés de traction de nos matériaux bidimensionnels, ce qui permet d'en tirer parti sous différentes formes et dans de nombreuses applications.

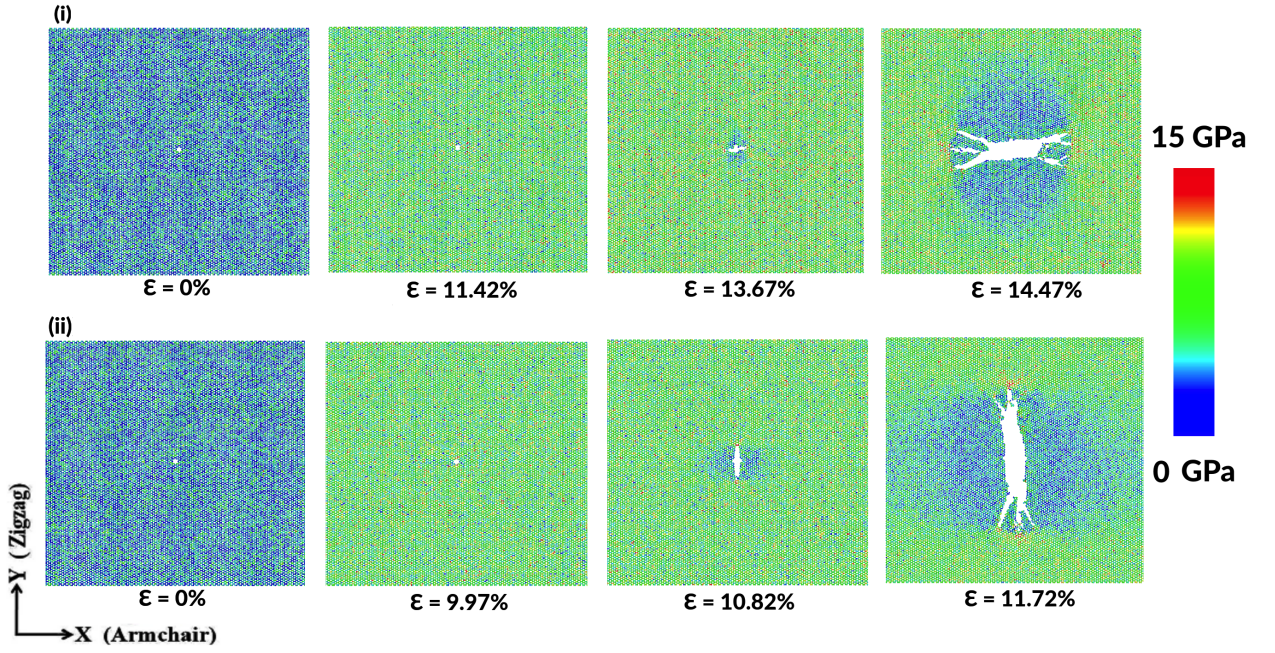


FIGURE IV.21 – Illustration du processus de déformation et de la distribution des contraintes de la monocouche poreuse InTe à 300K le long de la charge directionnelle (i) zigzag (axe y) (ii) armchair (axe x). La barre de couleur indique la contrainte en GPa.

2.2 Fissures

Nous avons introduit une pré-fissure en supprimant une ligne d'atomes au centre de la feuille dans une direction perpendiculaire à l'orientation de la charge, comme le montre la figure IV.22. Il convient de noter ici que la dimension minimale (soit la longueur ou la largeur) de la nanofeuille doit être au moins dix fois la longueur de la demi-fissure, pour éviter les effets de taille de la dimension finie [290, 291], par conséquent, nos longueurs de pré-fissures sont (approximativement ~ 1.5 nm, ~ 2.4 nm, ~ 3.2 nm et ~ 4 nm) et (approximativement ~ 2.7 nm, ~ 4.4 nm, ~ 6.1 nm et ~ 7.2 nm) pour les feuilles BO et InTe, respectivement.

Lors de l'augmentation de la longueur de la fissure dans la Figure. IV.23, la résistance à la rupture et la déformation de la monocouche BO diminuent en raison de la localisation de la contrainte autour de la pointe de la fissure [292, 293]. La réduction de la résistance à la rupture (déformation) pour les quatre longueurs de pré-fissure spécifiées de 1 nm à 4 nm est de 43 % (32 %) en chargement en armchair, et de 44 % (35 %) pour la contrainte en zigzag, respectivement. En présence d'une pré-fissure, le chargement en zigzag révèle une plus grande résilience à la déformation par rapport au chargement en armchair. Cela est principalement dû à leur chemin de propagation de fissure qui a été largement exploré dans la Fig. IV.24 discutée ci-dessous.

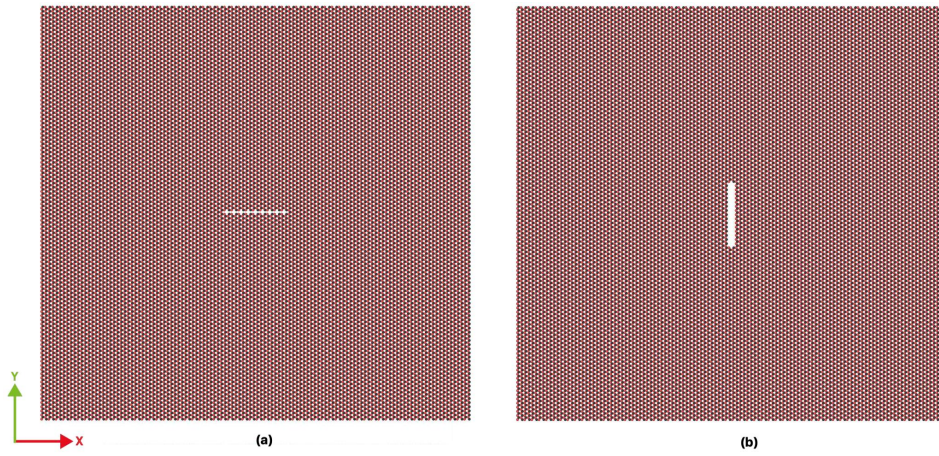


FIGURE IV.22 – Coordonnées initiales de la monocouche 2D- $M^{III}X^{VI}$ pré-fissurée. (a) Fissure dans la direction armchair. (b) Fissure dans la direction zigzag.

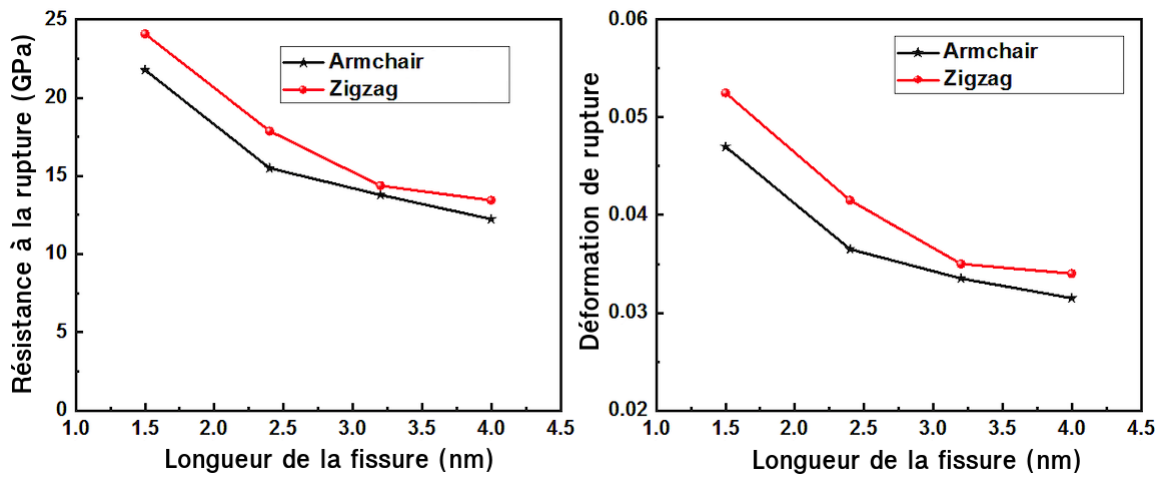


FIGURE IV.23 – Variations de la résistance à la rupture et de la déformation de rupture en fonction de la longueur de la fissure d'une feuille de BO pour une charge directionnelle en armchair et en zigzag.

La figure IV.24 montre le phénomène de rupture d'une feuille BO pré-fissurée dirigée en zigzag et armchair de 4 nm pour différents niveaux de déformation à 300 K. Le chargement est toujours appliqué perpendiculairement à la direction de la fissure, comme mentionné ci-dessus. Le schéma de propagation des fissures dans les deux cas semble analogue à première vue, mais l'examen approfondi permet de conclure que le mécanisme de propagation des fissures est différent. Plus précisément, pour une fissure en zigzag, il existe deux liaisons (une de chaque côté) situées en pointe de fissure qui sont perpendiculaires à la fissure. Une charge supplémentaire augmente la concentration de contraintes autour des extrémités de la fissure, ce qui déclenche la propagation de la fissure. Ce modèle de fissure est déjà indiqué pour certains matériaux 2D typiques [155, 294, 295]. Cependant, pour la fissure armchair de la Fig. IV.24-b, quatre (deux de chaque côté) liaisons symétriquement inclinées sont observées au fond de la fissure. Lorsque la concentration de contrainte augmente, deux chemins de propagation de fissure possibles, formant un angle de $\pm \frac{\pi}{3}$ avec la direction x, sont fournis. Ces phénomènes de ramification sont clairement observés aux déformations de 3.51% et 3.54%. En conséquence, la résistance à la rupture et la déformation dans la fissure armchair (chargement en zigzag) deviennent plus élevées par rapport à celles de la fissure en zigzag (chargement armchair), ce qui justifie davantage nos résultats susmentionnés.

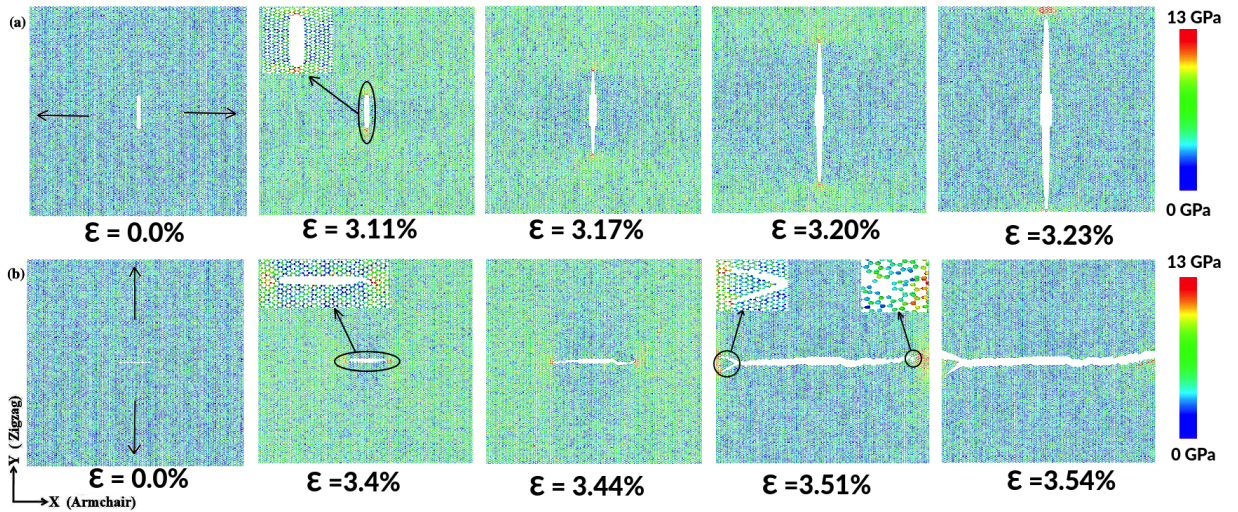


FIGURE IV.24 – Processus de déformation et distribution des contraintes d'une feuille de BO pré-fissurée de 4 nm à 300K sous une charge uniaxiale dans (a) l'axe armchair et (b) l'axe zigzag. La barre de couleur indique la contrainte en GPa et les flèches indiquent la direction de la charge.

La contrainte de rupture en fonction de l'allongement de la fissure de la feuille d'InTe pour une charge en zigzag et en armchair est représentée sur la figure IV.25.

Elle démontre que la contrainte de rupture de la feuille d'InTe pré-fissurée dépend fortement de la longueur de la fissure. En particulier, les réductions le long des directions de chargement en armchair et en zigzag sont d'environ 36% et 33% de 2.7 nm à 7.2 nm, respectivement. En raison du fait que les matériaux fragiles comme la feuille InTe, montrent presque entièrement une concentration de contraintes à la pointe de la fissure [292, 293]. Même ainsi, pour une même longueur de fissure, la contrainte de rupture est supérieure pour le chargement en zigzag que pour l'orientation armchair en raison des conditions de chargement. En détail, le mécanisme de propagation des fissures est largement exploré dans la figure IV.26, qui aide à comprendre ce phénomène. Le processus est similaire à ce que nous avons discuté précédemment pour la feuille BO. Donc, en un mot, lorsque la fissure en zigzag se formule (voir Fig. IV.26-ii), elle subit juste deux liaisons à la pointe de la fissure qui sont perpendiculaires à la fissure, puis la concentration de contraintes autour des extrémités de la fissure augmente avec l'augmentation de la charge. En conséquence, nous n'observons aucune ramification, juste un allongement de la fissure initiale [155, 294, 295]. En raison de cette caractéristique, la résistance à la rupture le long du chargement en zigzag s'avère plus élevée que celle le long armchair.

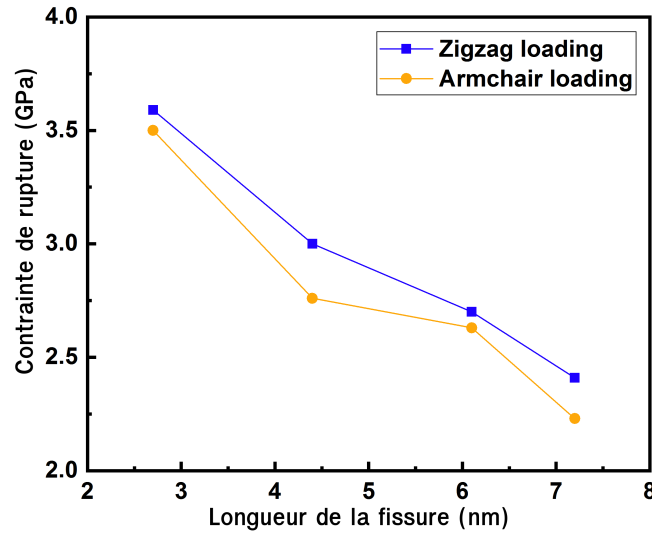


FIGURE IV.25 – Variations de la contrainte de rupture en fonction de la longueur de la fissure d'un nanofeuille InTe sous tension uniaxiale dans les directions zigzag et armchair.

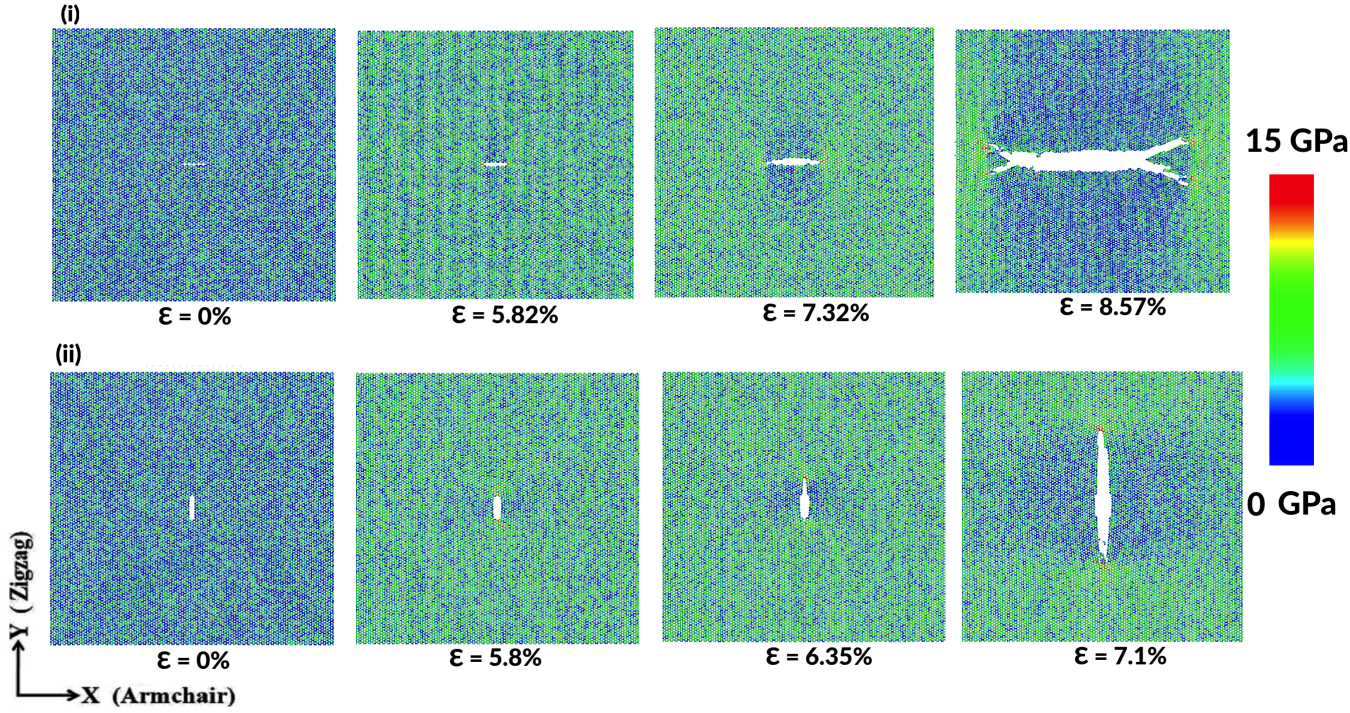


FIGURE IV.26 – Illustration du processus de déformation et de la distribution des contraintes d'une monocouche pré-fissurée InTe à 300K le long (i) d'un chargement directionnel en zigzag (axe y) (ii) d'un armchair (axe x). La barre de couleur montre la contrainte en GPa.

Ces résultats ont clairement montré que la présence de fissures dans les matériaux 2D réduit considérablement leurs propriétés mécaniques, ce qui nous a obligés à trouver un moyen de les traiter.

2.3 Contribution II

Contribution II

Réponse mécanique du borophène à couches $\mathcal{N}$: impact de la déformation, de la température, des lacunes et de l'intercalation

Résumé

Dans le cadre de nos recherches sur des matériaux bidimensionnels ayant de bonnes propriétés mécaniques afin de les étudier par des simulations de dynamique moléculaire, nous trouvons le borophène, qui a été synthétisé en 2015. Par ailleurs, le borophène possède un caractère anisotropique qui le distingue des autres matériaux tel que le silicène, la nitrure de bore hexagonal, le germanène. De plus, le borophène présente un module de Young et une déformation à la traction de 349 GPa, 820 GPa et 11%, 9% dans les directions zigzag et armchair, respectivement, ce qui rend ce matériau très favorable à une utilisation dans l'électronique flexible et comme matériau de renforcement dans les nanocomposites.

Dans ce deuxième article, nous avons étudié l'effet de l'empilement, de la température, de la vitesse de déformations, d'intercalation et des défauts de structure sur les propriétés mécaniques du monocouche de borophène. Nous avons trouvé que lorsque l'on augmente η (nombre de couches), le module de Young diminue, tandis que le coefficient de Poisson reste pratiquement inchangé. Notre résultat a montré que les résistances à la rupture du borophène multicouche sont fortement sensibles à la température, tandis que leur dépendance à la vitesse de déformation est relativement faible. En outre, l'influence de l'intercalation de l'azote et des différents types de lacunes révèle une valeur plus élevée de la résistance à la rupture et du module de Young en faveur de la direction armchair. De plus, les valeurs des résistances à la rupture dépendent du type, de la concentration et de l'emplacement du défaut. La résistance à la tension en zigzag est importante pour le borophène multicouches avec des défauts SV et DV-1, tandis que le borophène multicouches supporte très significativement la contrainte de traction armchair dans le cas de DV-2.

EPJ AP

Applied Physics

EPJ.org
your physics journal

Eur. Phys. J. Appl. Phys. **90**, 30401 (2020) DOI: 10.1051/epjap/2020200119

Mechanical response of η -layered borophene: impact of strain, temperature, vacancies and intercalation

Mohamed Saaoud, Kawtar Sadki, Lalla Btissam Drissi, and Faycal Djeflal

edp sciences

The title "The European Physical Journal" is a joint property of EDP Sciences, Società Italiana di Fisica (SIF) and Springer

Mechanical response of η -layered borophene: impact of strain, temperature, vacancies and intercalation

Mohamed Saaoud¹, Kawtar Sadki^{1,2}, Lalla Btissam Drissi^{1,2,3,*}, and Faycal Djeflal⁴

¹ LPHE, Modeling & Simulations, Faculty of Science, Mohammed V University in Rabat, 1014 RP, Rabat, Morocco

² CPM, Centre of Physics and Mathematics, Faculty of Science, Mohammed V University in Rabat, 1014 RP, Rabat, Morocco

³ Hassan II Academy of Science and Technology, Rabat, Morocco

⁴ LEA, University Mostefa Benboulaïd-Batna 2, Batna 05000, Algeria

Received: 27 April 2020 / Received in final form: 29 May 2020 / Accepted: 3 June 2020

Abstract. The mechanical behavior of few-layered borophene (η -LB), at different temperatures ranging from 10 to 800 K in conjunction with a variant strain-rate, is studied by employing molecular dynamics simulations based on the Stillinger-Weber potential. The uniaxial tensile deformations along the zigzag- and armchair-direction of the hexagonal lattice are considered for η -LB, with $\eta = 1, 2, 3, 4$. We find an extremely anisotropic mechanical response. Parameters such as Young's modulus and fracture strength are higher along the armchair-traction than the zigzag one due to the corrugated structure along the zigzag-axis. The fracture resistances of η -LB are strongly sensitive to temperature, while their dependence on the strain-rate is relatively low. The influence of nitrogen intercalation as well as vacancy defects on elastic behavior is also determined and discussed. The results are significantly affected by the defect's type, concentration, and location. Our findings provide useful insights for the design of LB for many applications requiring a practical large magnitude strain engineering.

1 Introduction

Over a decade, 2D Group-IV materials have attracted tremendous attention due to the fascinating physical and excellent mechanical properties revealed by their counterpart graphene [1,2]. The high rigidity, large stiffness and high thermal conductivity of graphene make it a potential element in the treatment of pressure sensors, in nanomechanics, in nanoelectronic circuit applications and in thermal management materials [3–5]. The elastic properties of silicene and germanene are smaller than those of graphene, and their phononic thermal conductivity, their heat capacity and their fracture (strength, strain) are sensitive to temperature [6–9]. At 0 K, the Si and Ge sheets can be rippled with various wavelengths, without any compressive strain of the layer [10]. Stanene, the buckled analogue of graphene, exhibits high thermal conductivity and thermoelectric efficiency, furthermore, its fracture strength and strain reach their maximum with the loading rate [11,12].

The combination of group-IV elements generates a new class of hybrid materials with great potential for nanomechanical applications [13–15]. Graphene-based hybrids CX (where X = Si, Ge, Sn) exhibit a planar honeycomb geometry with sp^2 hybridization. Sublattice asymmetry results in a non-zero band gap. GeC shows much softer ultimate strengths compared to graphene with a large Poisson's ratio, that is about 1.5 times that of graphene [16]. The

SnC monolayer has a high Debye temperature, a large thermal conductivity and a negative Grüneisen parameter [17]. It also reveals that the single vacancy turns the system into metal while the double vacancies transform it into a semiconductor with a direct band gap 0.37 eV [18]. When increasing the defect concentration, non-monotonic growth of the mean square displacement is observed in the SiC sheet [19].

The list of 2D hexagonal crystals exceeds the well investigated group IV elements to include other groups. Boron, exhibits many 2D allotropes and various structural polymorphs containing mostly hexagonal and triangular lattices [20–23]. The synthesis leads to two different crystal structures, (i) the planar structure with distributed voids [24] and (ii) the corrugated structure without voids [25]. Borophene displays a strong electron-phonon interaction and a metallic character [26]. Besides its anisotropic Young's modulus, its fracture strength and its thermal conductivity, monolayer-B has negative in-plane and out-of-plane Poisson's ratios [27–29] and impressive negative values of thermal expansion coefficients with a strong phonon-phonon scattering [30]. Flat borophene films constitute a great choice as anode materials in rechargeable ion batteries, ought to their high storage capacity for Li, Mg, Na ions [31]. Thus, borophene is a promising candidate for many applications in the energy fields, such as metal ion batteries [32,33] and hydrogen storage [34,35].

The results obtained for monolayer materials have inspired numerous follow-up works, especially for multilayered structures. Increasing the number of layers

* e-mail: drissilb@gmail.com

in graphene, implements the bonding strength between neighboring layers, causing the reduction of the elastic modulus and the ultimate strength [36]. For a number of layers exceeding six, multilayer graphene tends to exhibit graphite bulk properties [37]. Molecular dynamics simulations on a few layers black phosphorene show that stacking the layers together enhances compressive and buckling strengths, while this has little influence on both Young's modulus and tensile strength [38]. In contrast, the negative Poisson's ratio of a few layers orthorhombic arsenic varies from -0.09 (for monolayer) to -0.12 (in four layers), that is very close to the bulk value [39]. In MoS_2 , the decreasing trend in strength observed for 6 to 12 layers, is unclear when the number varies from 2 to 6 layers due to the transition from intraplanar to interplanar fractures [40]. Few-layers borophene (FLB) displays a large energy splitting and a strong interlayer vdW interactions [41].

To tune and enhance the physical properties of layered thin 2D-materials, traditional strategies such as implantation [42] or diffusion processes [43,44] have been outstretched to new effective ways like surface charge transfer [45], intercalation [46–48] and field effect modulation methods [49]. In layered chalcogenides, the intercalation considerably improves the thermal properties for better thermoelectric performance [50]. Li ions positioned between the graphene/ MoS_2 heterostructure strengthen the binding energy [51]. The intercalated atoms C, N, B and O cause the opening of an energy gap filled with impurity states in bilayer graphene [52,53]. Besides, the highest probability of perfect substitution is observed for the incident N ions which lead to p-type doping in bilayer graphene. It follows that the nitrogen intercalation, that seems to be an excellent choice for layered graphene, is a promising route to achieve charge neutrality in epitaxial graphene grown on a semiconductor SiC substrate [54].

Recall that the materials manufactured are not perfect and accordingly, since they exhibit different types of defects. The presence of defects in materials influences both the physical and chemical properties and especially the mechanical properties [55,56]. In the case of boron sheets, the difference between the experimentally produced and the theoretically predicted material is due to the regular removing process of the boron atoms in the supercell. To better investigate few layered borophene, it is essential to evaluate the impact of the gradual random suppressed atoms on its properties.

Notably, most of the above-cited results motivate us to study the influence of temperature and strain on the structural and elastic properties of layered borophene. Furthermore, the lack of work on defective FLBs as well as the crucial role of the intercalated nitrogen atoms to enhance the 2D materials' properties, are other imperative necessities to carry out this study. In the present paper, we use molecular dynamics (MD) simulations instead of first-principles density functional theory calculations which are challenged especially with the inaccessible system size, the unlimited time scale and measuring the fluctuations and movements of atoms. The mechanical properties of the FLB, under uniaxial tensile, at a variant temperature in conjunction with a variant strain rate are determined. Increasing the layers numbers revealed a strong anisotropy

regarding the fractures strength and Young's modulus. The fractures strength display an important temperature sensitivity, while they exhibit a relatively low sensitivity in terms of strain-rate. The effect of the intercalated nitrogen as well as the defects vacancy on layered structures are also investigated and discussed.

This paper is organized as follows: Section 2 outlines a detailed analytical framework of the molecular dynamics (MD) simulations. The results are described and discussed in Section 3. The conclusion is given in the last section.

2 Framework for analysis

The molecular dynamics simulations are conducted using the LAMMPS molecular dynamics package [57]. Interatomic interactions between boron atoms are considered using the Stillinger-Weber (SW) potential [58,59] for the energy E of a system of atoms is expressed as

$$E = \sum_i \sum_{j>i} \phi_2(r_{ij}) + \sum_i \sum_{j \neq i} \sum_{k>j} \phi_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk}), \quad (1)$$

where the two-body term ϕ_2 and the three-body term ϕ_3 describe the bond and angle interactions, respectively. The summations in the formula are over all neighbors j and k of atom i . The terms r_{ij} and r_{ik} indicate the pair separations and θ_{ijk} is the angle between the separation vectors centering on atom i . This potential is parameterized based on the valence force field and the computed phonon spectrum as explicitly reported in [58–60].

In the case of intercalation, we use Lennard-Jones (LJ) and SW potentials [61]. The number of borophene layers (η) varies from 1 to 4. Every layer has a dimension of $(57.4 \times 48.3) \text{ \AA}^2$ in the plane (x, y), a thickness of $4.8 \text{ \AA}$ and contains 1200 atoms. Along the armchair and zigzag directions indicated in Figure 1, an uniaxial tension is applied. The magnitude of the strain parameter (ε) is increased in steps of 0.005 and run until the failure of the structures.

For 2D orthorhombic borophene, the Young modulus Υ and the Poisson-ratios along the x (zigzag)- and y (armchair)-directions are calculated in terms of four nonzero elastic stiffness constants C_{11}, C_{22}, C_{12} and C_{66} using the following expressions as [62]:

$$\Upsilon_x = \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{22}}, \quad v_x = \frac{C_{12}}{C_{22}} \quad (2)$$

$$\Upsilon_y = \frac{C_{11}C_{22} - C_{12}^2}{C_{11}} \quad \text{and} \quad v_y = \frac{C_{12}}{C_{11}}.$$

The simulations were carried out with temperatures ranging from 10 to 800 K in conjunction with a set of strain rates from 0.04 to 0.06 ps^{-1} . The system was equilibrated using Nose-Hoover barostat (NPT) ensemble (fixed number of atoms, pressure and temperature) for 20 ps for internal stresses to be fully released with a temperature damping constant of 0.1 ps and pressure damping constant of 1 ps. Then an uniaxial tensile with a constant strain rate of 10^{-2} ps^{-1} is applied along the zigzag and the armchair directions. During the relaxation of intercalated systems, we employ the conjugate gradient (CG) and the number of total force evaluations was set to 10000.

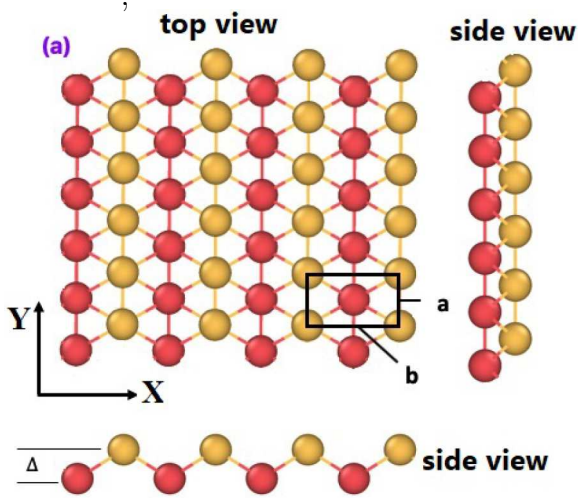


Fig. 1. Top and side views of the atomic structure of borophene with the buckled configuration along the X (zigzag) and Y (armchair) directions. Two colors for the B-atoms are used to indicate the buckling in each layer.

For vacancy defects, we remove randomly 0.5 to 2% atoms of the total atoms in each layer.

3 Results and discussion

Borophene monolayer has a buckled hexagonal structure. The unit cell is marked by the black rectangle in Figure 1. Based on the Stillinger-Weber (SW) results for the relaxed atomic structure, the lattice constants are $a = 1.613$ Å and $b = 2.864$ Å respectively, and the buckling height Δ takes the value of 0.911 Å. The interatomic distances between the first nearest neighbours are 1.613 Å for the long bond (that links the top and the bottom atoms of borophene sheet) and 1.879 Å for the short bond (binding two atoms on the same layer). These parameters obtained by employing MD simulations are in good agreement with previous works using first-principles calculations [63,64]. This confirms the accuracy of our simulations.

To study, layered borophene (η -LB) with a number η of atomic layers varying from 1 to 4, we stack η boron-monolayers in AA configuration. The interlayer distances reported for η -LB in Table 1 are in accordance with values obtained from DFT calculations [41].

Insight on fracture behavior of layered borophene under uniaxial tensile loading along its zigzag and armchair directions at room temperature (300 K) is depicted in the stress-strain curves in Figure 2. Along both directions, the stress increases monotonically with the applied strain, in the elastic loading stage. Then, it abruptly drops at the yielding point, indicating the absence of plastic region. Furthermore, when increasing the number η of layers, the fracture strength (σ), defined as the maximal peak in the stress-strain curve, decreases from 55.17/21.29 GPa for $\eta = 1$ to 33.41/11.21 GPa for $\eta = 4$ along the armchair/zigzag directions, respectively. The same behavior is shown for multi-layer MoS_2 membranes due to the transition from intraplanar to interplanar fracture mechanism [40].

Table 1. Interlayer distances d in (Å), Young's modulus Υ and strength σ in GPa, fracture strain ε for η -layered borophene along both armchair ($-y$) and zigzag ($-x$) directions.

η	d	Υ_x	Υ_y	σ_x	σ_y	ε_x	ε_y
1	—	349.39	820.03	21.29	55.17	0.1124	0.0987
2	3.072	264.69	621.23	15.98	40.39	0.1121	0.092
3	2.957	247.67	581.29	15.06	37.76	0.1118	0.0895
4	2.956	239	560.94	11.21	33.41	0.071	0.083

In contrast, the variation of the fracture strain is less pronounced for η ranging between $\eta = 1$ and $\eta = 4$ and it is quite negligible when comparing $\eta = 1, 2$ and 3 , especially under zigzag-loading. The curves reveal also a strong anisotropy since the fractures strength for armchair-forces are higher than the zigzag ones due to the corrugated structure along the zigzag-axis. It follows that the values of the Young modulus of the monolayer borophene is more than doubled, it is in particular 2.3 times larger, for armchair-strain compared to zigzag direction as listed in Table 1. This difference ought to the strong buckling along the zigzag direction as reported for monolayer borophene [27]. When increasing η , the Young's modulus drops approximately by 24–31% for the two applied loadings. Compared to other 2D monosheets, such as phosphorene, silicene and MoS_2 monolayers [65–67], one deduces that 1-LB is much stronger. When increasing η , the Young modulus decreases, while the Poisson ratio remains quite unchanged with $\nu_x \simeq -0.03$ and $\nu_y \simeq -0.07$. Our results are in agreement with multilayers black phosphorous [65] and MoS_2 [40]. These changes are mainly attributed to the effect of the Van der Waals interactions that are the responsible of stacking the different layers in the system [41]. Finally, the results show that η -LB are much stiffer along the armchair direction than the zigzag one since it is easier to apply zigzag-strain than armchair-loading. Thus η -layered borophene constitutes a great candidate for practical large-magnitude-strain engineering.

When increasing the temperature in the range [10–500] K, Figure 3 shows a drop of the fracture strength for the armchair and zigzag forces. This decrease is also observed for the corresponding fracture strain. When increasing the number of layers, the descent is attributed to the thickness effect in accordance with multilayered MoS_2 [40]. Notice also that, at 10 K, the fracture strength that is 69.08 GPa and 24.79 GPa for 1-layer borophene along the armchair and zigzag direction, respectively is close to the predictions from first-principles calculations reported in [28,68]. These parameters start decreasing up to 500 K, which means that higher temperatures result in an earlier fracture, owing to the large fluctuations experienced by some bonds that can easily reach the breaking point during the applied loading.

The effect of applied tensile strain rate, defined as the change in deformation of a material with respect to time, on mechanical properties of η -LB is examined at different temperatures $T = 200, 500$ and 800 K. As shown in Figure 4 at fixed η , the increase of strain rate deals with a slight increase in the fracture strength. More precisely,

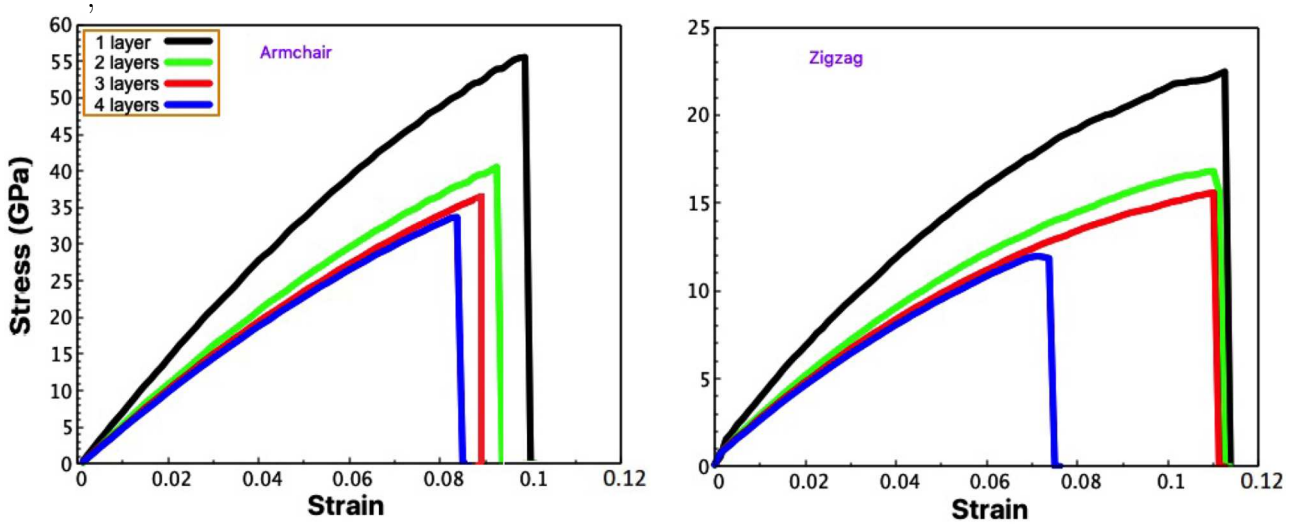


Fig. 2. Stress-strain curves of η -LB under uniaxial tension along armchair and zigzag directions at room temperature.

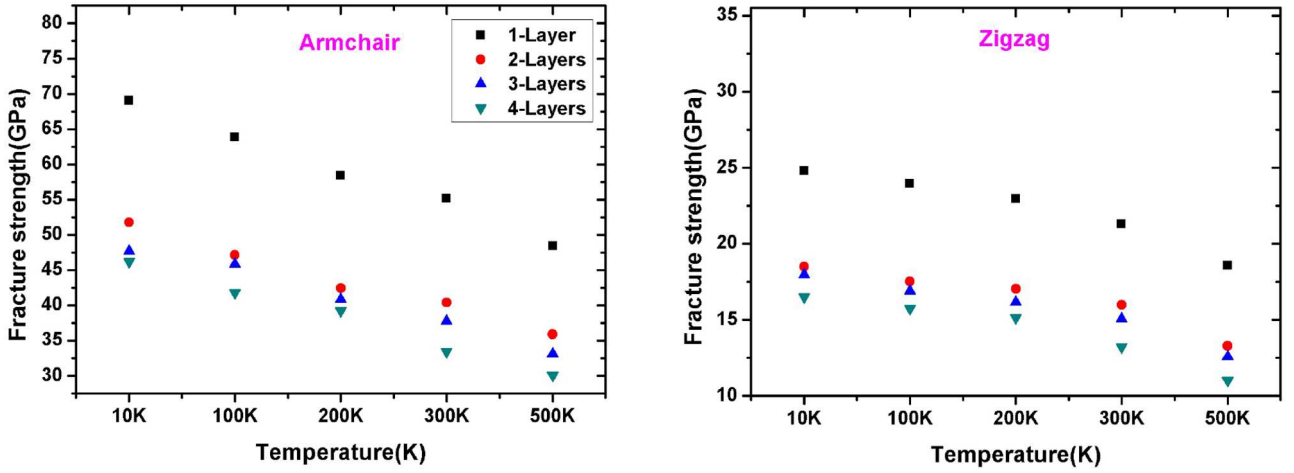


Fig. 3. Effect of temperature on fracture strength for layered-B along armchair and zigzag directions.

at 200 K, the fracture strength of 1-LB in the armchair and zigzag directions increase up to (3.6, 13.7%) and (5.8, 12.3%), respectively. While they reach (6.3, 16.7%) and (5, 4.3%), respectively for 4-LB. Notice that a possible reason for the increases of fracture strength at fixed η is due to the fact that at a slower strain rate the atoms get more time to respond with the thermal fluctuations. Consequently, the chance to overcome the energy barrier to break bonds at a lower strength gets increased.

When increasing $\eta = 1$ to 4, the fracture strength at 800 K drops approximately by 30% along the armchair and zigzag directions respectively, revealing a less significant effect of strain rate on the number of layers compared to the influence of temperature, as obviously observed for $\eta = 2$ and 3. It follows that the Van der Waals interactions and the buckled structure of borophene are the main responsible of the opposite variations of the fracture parameters in terms of η and x/y -directions.

Based on [52,69], we highlight how borophene reacts with nitrogen atoms (N) by investigating the influence of intercalate N located at the bridge site (positioned on the

middle of B-B bond). As depicted in Figure 5, the number of nitrogen atoms varies from 1 up to 4 with different distributions generating 12 different configurations. In this work, we consider 9 intercalated heterostructures, namely 4N/4L, 3N/4L, 2N/4L, 1N/4L, 4N/3L, 3N/3L, 2N/3L, 1N/3L, 4N/2L, 3N/2L, 2N/2L, 1N/2L, such that 4N/3L refers to 4 nitrogen atoms per each interlayer, and in 1N/4L we have intercalated 1 nitrogen atom between each two layers while 3-nitrogen placed in the interdistance within two-layers is given by 3N/2L. The configurations 2N are not reported since the corresponding results are quite similar to the 1N cases.

The values of Young and shear modulus, reported in Table 2, show a more significant decrease when increasing the number of η layers than when adding the N-atoms at fixed η . This can be attributed to the influence of Van der Waals interactions that become stronger at specific interlayer distance and limit the effect of nitrogen atoms. In all configurations, the highest values of elastic parameters are observed along y -direction compared to those along the x -direction. Compared to pristine η -LB, one can

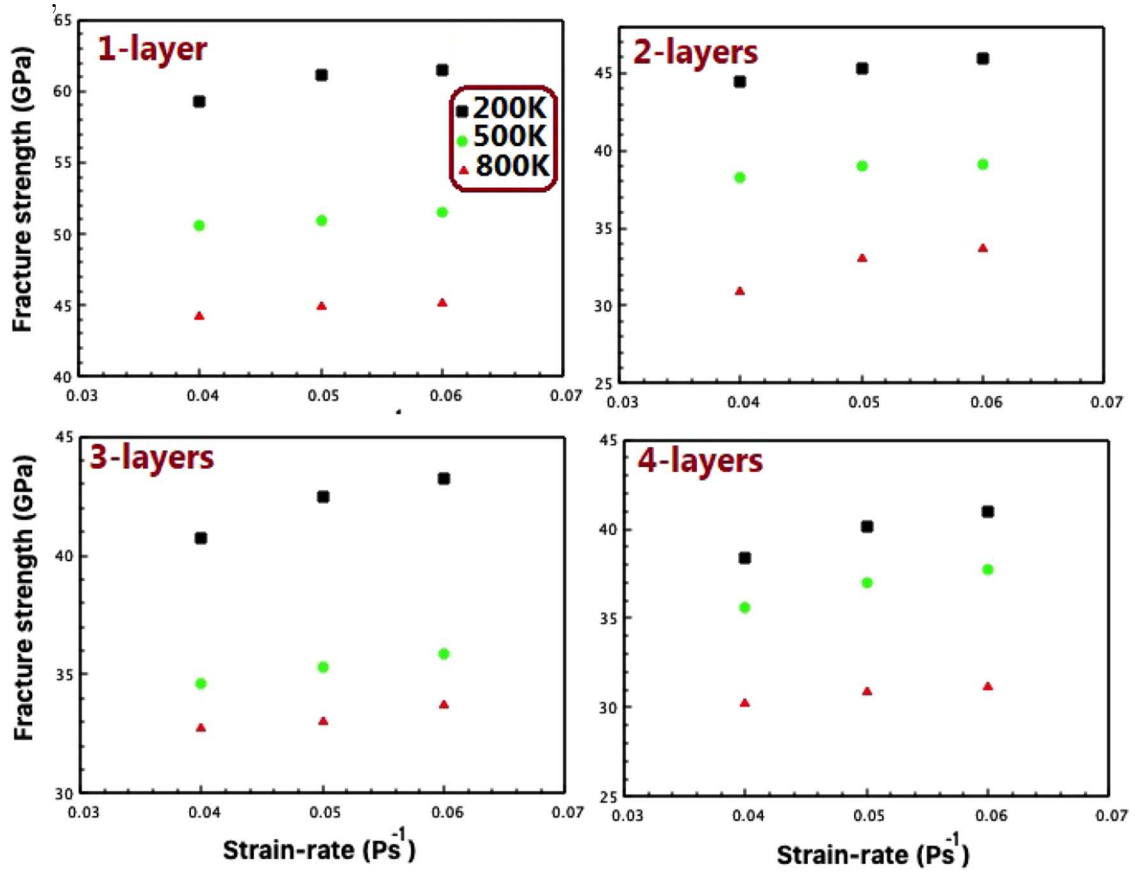


Fig. 4. The variation of the fracture strength as function of the strain rate at different temperatures along armchair direction.

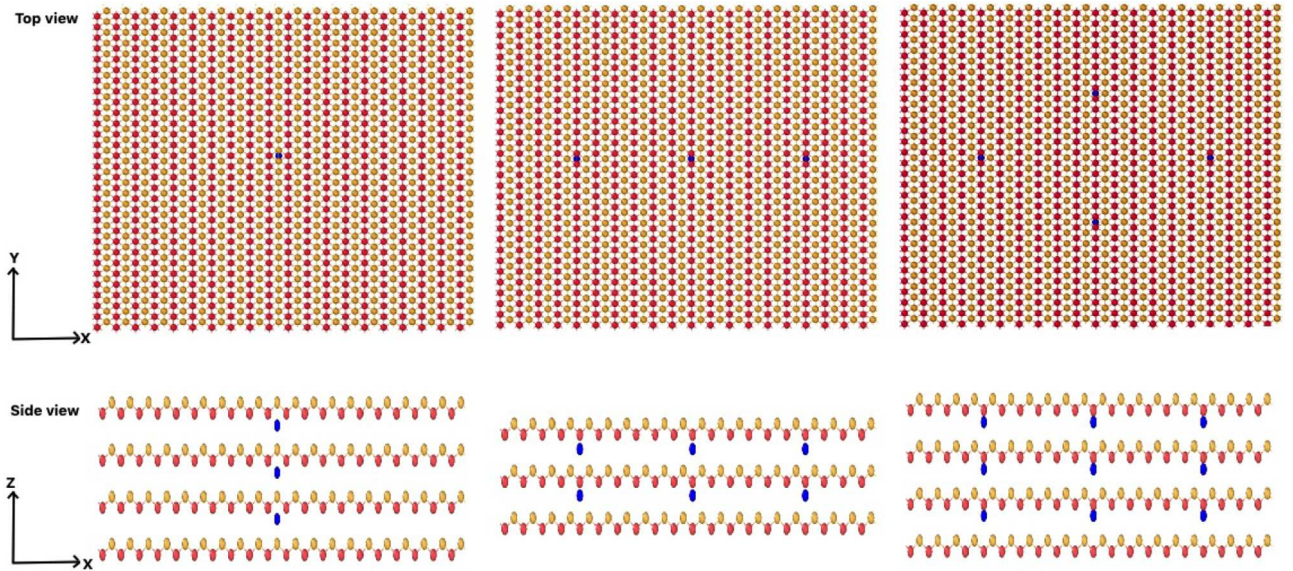


Fig. 5. Top and side views of relaxed geometrical structures of intercalated layered borophene, illustrating 1N/4L, 3N/3L, 4N/4L.

deduce that the intercalation renders the material softer since little external force can deform it.

Furthermore, the Poisson ratio of the N-intercalated η -layered borophene keeps its negative sign showing that these materials remain auxetic along both zigzag and armchair axis.

The influence of vacancy defects on the mechanical response of LB is also investigated. Single vacancy (SV) and double vacancies (DV) are created by removing 0.5 to 2% of the total B-atoms from the supercell. DV2 and DV1 defects are obtained by removing two neighboring atoms along the y-direction for DV2, and along the diagonal

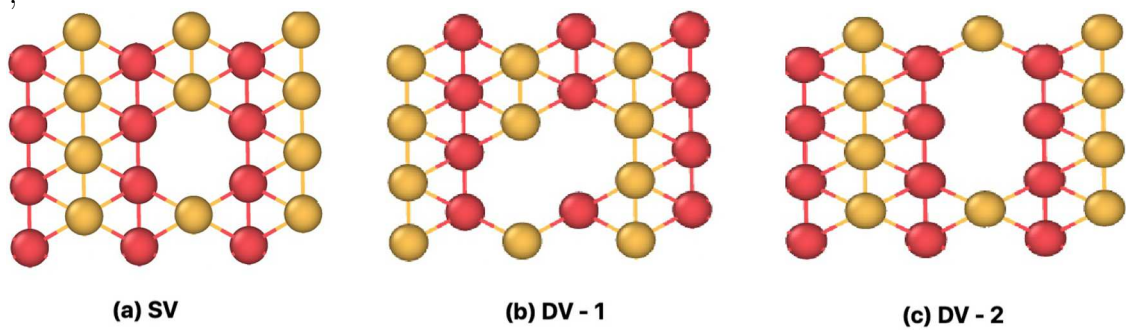


Fig. 6. Crystal structure of single vacancy (SV) and double vacancy (DV) defects in mono-BL.

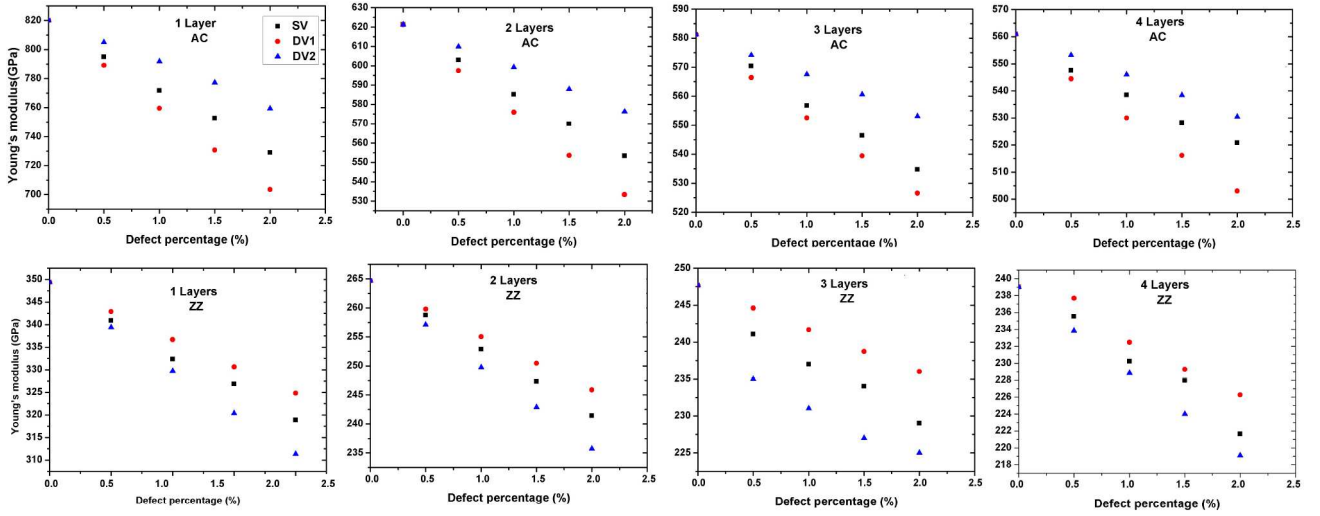


Fig. 7. Young's modulus of η -LB as a function of vacancy defects concentration along zigzag and armchair directions.

Table 2. Young modulus and shear modulus in GPa for η -LB intercalated by nitrogen atoms along the Cartesian axis x and y .

η -Layers	Modulus	1N	3N	4N
2L	Υ_x	259	251	245
	Υ_y	617	604	596
	G	138	132	127
3L	Υ_x	241	236	233
	Υ_y	570	564	560
	G	129	126	122
4L	Υ_x	232	228	224
	Υ_y	552	546	539
	G	124	119	116

direction for DV1, while deleting one atom from the center of a hexagon in the supercell generates SV defect as plotted in Figure 6.

Figure 7 shows a drop of Young's modulus by increasing the vacancy defects concentrations. The value of Υ corresponding to SV defective borophene intermediates between the one of DV1 and DV2 vacancies at all concentrations and along both zigzag and armchair directions. When increasing the number of layers, the magnitude of

Υ reduces. It follows that among all vac-defective η -LB configurations, DV-2 induces the highest Young's modulus along the armchair direction and the smallest one along the zigzag-axis with respect to DV-1 and SV. A possible explanation for this finding may be the orientation of the defects in each sheet and their position with respect the puckering that is along the zigzag direction.

As displayed in Figure 8, the lowest fracture strength is found along the armchair-axis compared to the zigzag one for the three kind of vac-defects. It results that vacancies render LB enduring quite larger tensile along the armchair direction than the zigzag one. Furthermore, for each type of vacancy, the increase of its concentration reduces the fracture strength in η -LB. The DV-2 defect leads to the highest (weakest) value compared to SV and DV-1 defects along the armchair (zigzag)-axis. This can be attributed to the long bond (short bond) of borophene that is perpendicular to the loading direction, namely armchair (zigzag)-direction. Finally, compared to pristine η -LB, the increase of layers number, at fixed type of defect, decrease slightly the fracture values in accordance with black phosphorus [38]. Thus combining all the external parameters, namely η , intercalation, defects type and concentration constitutes an interesting way to adapt BL for thermoelectric cooling, nonmechanical flexible devices and gas storage.

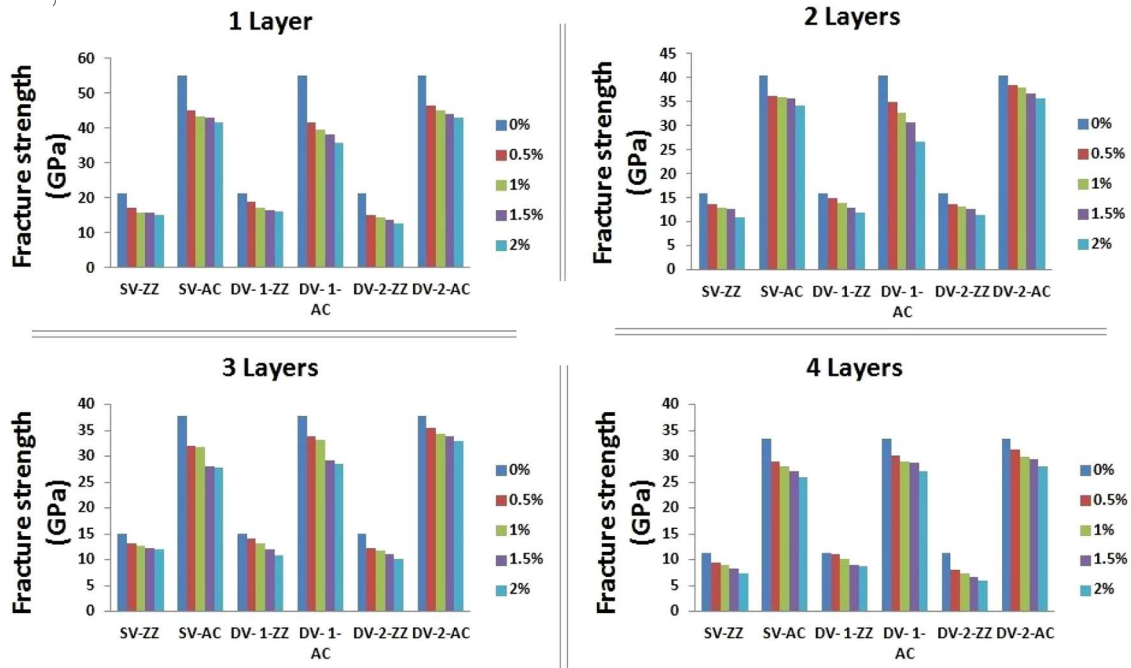


Fig. 8. Fracture strength of pristine and defective layered borophene as function of vacancy defects concentrations along the armchair and the zigzag directions.

4 Conclusion

In summary, by performing MD simulations on (FLB), we studied the mechanical comportment of pristine, N-intercalated and defective one till four-layers of borophene under uniaxial tension along the armchair and the zigzag directions. It is found that the auxetic character as well as the strong anisotropy of the elastic parameters describing the monolayer B are preserved for the stacked layers. The increase in temperature and strain rate impacts the fracture strength. The influence of the nitrogen's intercalation and the different types of vacancies reveals higher value of the fracture strength and of the Young's modulus in favor of the armchair direction due to the buckling of the structures in the zigzag axis. Furthermore, the values of the fracture strengths depend on the defect's type, concentration, and location. The resistance to the zigzag tension is important for layered borophene with SV and DV-1 defects, while LB sustains very significantly the armchair tensile strain in the case of DV-2. Finally, the present results provide a comprehensive understanding of the mechanical response of layered borophene, making it an excellent candidate for application based nanodevices.

The authors would like to acknowledge the "Académie Hassan II des Sciences et Techniques"-Morocco for its financial support. The authors also thank the LPHE-MS, Faculty of Sciences, Mohammed V University in Rabat, Morocco for the technical support through computer facilities, where all the calculations have been performed.

Author contribution statement

M. Saaoud and K. Sadki performed numerical calculations, collected the data, generated the results and writing

part of manuscript. The analysis, discussion and writing were carried out in cooperation with L. B. Drissi, who conceived the study and were in charge of overall direction and planning. She also made contributions and improvements in the initial and reviewed version of the work. F. Djeflal was involved in the discussion and writing part of manuscript.

References

1. Y. Zhang, T.T. Tang, C. Girit, Z. Hao, M.C. Martin, A. Zettl, M.F. Crommie, Y.R. Shen, F. Wang, *Nature* **459**, 820 (2009)
2. C. Lee, X. Wei, J.W. Kysar, J. Hone, *Science* **321**, 385 (2008)
3. A.K. Geim, K.S. Novoselov, *Nat. Mater.* **6**, 183 (2007)
4. D.G. Papageorgiou, I.A. Kinloch, R.J. Young, *Prog. Mater. Sci.* **90**, 75 (2017)
5. D. Ghosh, I. Calizo, D. Teweldebrhan, E.P. Pokatilov, D.L. Nika, A.A. Balandin, C.N. Lau, *Appl. Phys. Lett.* **92**, 151911 (2008)
6. Q.X. Pei, Z.D. Sha, Y.Y. Zhang, Y.W. Zhang, *J. Appl. Phys.* **115**, 023519 (2014)
7. M.Q. Le, *Int. J. Mod. Phys. B* **32**, 1850241 (2018)
8. X. Gu, R. Yang, *J. Appl. Phys.* **117**, 025102 (2015)
9. R. Chegel, S. Behzad, *Sci. Rep.* **10** (2020)
10. M.C. Hanf, A. Marjaoui, R. Stephan, M. Zanouni, M. Diani, Ph. Sonnet, *J. Phys.: Condens. Matter* **32**, 195503 (2020)
11. S. Mojumder, A. A. Amin, M.M. Islam, *J. Appl. Phys.* **118**, 124305 (2015)
12. B. Peng, H. Zhang, H. Shao, Y. Xu, X. Zhang, H. Zhu, *Sci. Rep.* **6**, 20225 (2016)
13. H. Şahin, S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Bekaroglu, E. Aktürk, R.T. Senger, S. Ciraci, *Phys. Rev. B* **80**, 155453 (2009)

14. T.Y. Lü, X.X. Liao, H.Q. Wang, J.C. Zheng, J. Mater. Chem. **22**, 10062 (2012)
15. L.B. Drissi, N.B. Kanga, S. Lounis, F. Djeflal, S. Haddad, J. Phys.: Condens. Matter **31**, 135702 (2019)
16. Q. Peng, C. Liang, W. Ji, S. De, Mech. Mater. **64**, 135 (2013)
17. K. Sadki, M.H. Kourra, L.B. Drissi, Superlattices Microstruct. **132**, 106172 (2019)
18. S. Majidi, A. Achour, D.P. Rai, P. Nayebi, S. Solaymani, N.B. Nezafat, S.M. Elahi, Res. Phys. **7**, 3209 (2017)
19. K. Sadki, F.Z. Zanane, M. Ouahman, L.B. Drissi, Mater. Chem. Phys. **242**, 122474 (2020)
20. T. Ogitsu, F. Gygi, J. Reed, Y. Motome, E. Schwegler, G. Galli, J. Am. Chem. Soc. **131**, 1903 (2009)
21. X. Sun, X. Liu, J. Yin, J. Yu, Y. Li, Y. Hang, X. Zhou, M. Yu, J. Li, G. Tai, W. Guo, Adv. Funct. Mater. **27**, 1603300 (2017)
22. E.S. Penev, S. Bhowmick, A. Sadrzadeh, B.I. Yakobson, Nano Lett. **12**, 2441 (2012)
23. X.F. Zhou, X. Dong, A.R. Oganov, Q. Zhu, Y. Tian, H.T. Wang, Phys. Rev. Lett. **112**, 085502 (2014)
24. B. Feng, J. Zhang, Q. Zhong, W. Li, S. Li, H. Li, P. Cheng, S. Meng, L. Chen, K. Wu, Nat. Chem. **8**, 563 (2016)
25. A.J. Mannix, X.F. Zhou, B. Kiraly, J.D. Wood, D. Alducin, B.D. Myers, X. Liu, B.L. Fisher, U. Santiago, J.R. Guest, M.J. Yacaman, A. Ponce, A.R. Oganov, M.C. Hersam, N.P. Guisinger, Science **350**, 1513 (2015)
26. J.E. Padilha, R.H. Miwa, A. Fazzio, Phys. Chem. Chem. Phys. **18**, 25491 (2016)
27. Z.D. Sha, Q.X. Pei, Qing-Xiang, K. Zhou, Z. Dong, Y.W. Zhang, Extreme Mech. Lett. **19**, 39 (2018)
28. H. Wang, Q. Li, Y. Gao, F. Miao, X.F. Zhou, X.G. Wan, New J. Phys. **18**, 073016 (2016)
29. M.Q. Le, B. Mortazavi, T. Rabczuk, Nanotechnology **27**, 445709 (2016)
30. H. Sun, Q. Li, X.G. Wan, Phys. Chem. Chem. Phys. **18**, 14927 (2016)
31. B. Mortazavi, O. Rahaman, S. Ahzi, T. Rabczuk, Appl. Mater. Today **8**, 60 (2017)
32. S. Er, G.A. de Wijs, G. Brocks, J. Phys. Chem. C **113**, 18962 (2009)
33. A. Lebon, R. H. Aguilera-del-Toro, L.J. Gallego, A. Vega, Int. J. Hydrogen Energy **44**, 1021 (2019)
34. H.R. Jiang, Z. Lu, M.C. Wu, F. Ciucci, T.S. Zhao, Nano Energy **23**, 97 (2016)
35. J. Liu, C. Zhang, L. Xu, S. Ju, RSC Adv. **8**, 17773 (2018)
36. B. Mortazavi, Y. Rémond, S. Ahzi, V. Toniazzi, Comput. Mater. Sci. **53**, 298 (2012)
37. B. Partoens, F.M. Peeters, Phys. Rev. B **74**, 075404 (2006)
38. L. Li, J. Yang, Sci. Rep. **8**, 3227 (2018)
39. J. Han, J. Xie, Z. Zhang, D. Yang, M. Si, D. Xue, Appl. Phys. Express **8**, 041801 (2015)
40. P. Li, C. Jiang, S. Xu, Y. Zhuang, L. Gao, A. Hu, H. Wang, Y. Lu, Nanoscale **9**, 9119 (2017)
41. H. Zhong, K. Huang, G. Yu, S. Yuan, Phys. Rev. B **98**, 054104 (2018)
42. M.A. Hughes, Y. Fedorenko, B. Gholipour, J. Yao, T.H. Lee, R.M. Gwilliam, K.P. Homewood, S. Hinder, D.W. Hewak, S.R. Elliott, R.J. Curry, Nat. Commun. **5**, 1 (2014)
43. J. Suh, T.L. Tan, W. Zhao, J. Park, D.Y. Lin, T.E. Park, J. Kim, C. Jin, N. Saiga, S. Ghosh, Z.M. Wong, Y. Chen, F. Wang, W. Walukiewicz, G. Eda, J. Wu, Nat. Commun. **9**, 1 (2018)
44. V.P. Pham, G.Y. Yeom, Adv. Mater. **28**, 9024 (2016)
45. X. Zhang, Z. Shao, X. Zhang, Y. He, J. Jie, Adv. Mater. **28**, 10409 (2016)
46. J. Wan, S. D. Lacey, J. Dai, W. Bao, M.S. Fuhrer, L. Hu, Chem. Soc. Rev. **45**, 6742 (2016)
47. G.Q. Huang, Z.W. Xing, D.Y. Xing, Appl. Phys. Lett. **106**, 113107 (2015)
48. J.N. Coleman, W.J. Blau, A.B. Dalton, E. Munoz, S. Collins, B.G. Kim, J. Razal, M. Selvidge, G. Viegro, R.H. Baughman, Appl. Phys. Lett. **82**, 1682 (2003)
49. J. Wang, H. Fang, X. Wang, X. Chen, W. Lu, W. Hu, Small **13**, 1700894 (2017)
50. C. Wan, Y. Wang, N. Wang, W. Norimatsu, M. Kusunoki, K. Koumoto, J. Electron. Mater. **40**, 1271 (2011)
51. T. Ahmed, N.A. Modine, J.X. Zhu, Appl. Phys. Lett. **107**, 043903 (2015)
52. S.J. Gong, W. Sheng, Z.Q. Yang, J.H. Chu, J. Phys. Condens. Matter **22**, 245502 (2010)
53. S. Zhao, J. Xue, Phys. Rev. B **86**, 165428 (2012)
54. N.M. Caffrey, R. Armiento, R. Yakimova, I.A. Abrikosov, Phys. Rev. B **92**, 081409 (2015)
55. M.C. Wang, C. Yan, L. Ma, N. Hu, M.W. Chen, Comput. Mater. Sci. **54**, 236 (2012)
56. A. Dadras, A.R. Albooyeh, A.H. Mashhadzadeh, Appl. Surf. Sci. **498**, 143867 (2019)
57. S. Plimpton, Comput. Mater. Sci. **4**, 361 (1995)
58. Y.P. Zhou, J.W. Jiang, Sci. Rep. **7**, 45516 (2017)
59. S. Plimpton, J. Comput. Phys. **117**, 1 (1995)
60. F.H. Stillinger, T.A. Weber, Phys. Rev. B **31**, 5262 (1985)
61. L. Lindsay, D.A. Broido, Phys. Rev. B **84**, 155421 (2011)
62. R.C. Andrew, R.E. Mapasha, A.M. Ukpong, N. Chetty, Phys. Rev. B **85**, 125428 (2012)
63. A. Lherbier, A.R. Botello-Mández, J.C. Charlier, 2D Mater. **3**, 045006 (2016)
64. B. Peng, H. Zhang, H. Shao, Y. Xu, R. Zhang, H. Zhu, J. Mater. Chem. C **4**, 3592 (2016)
65. Q. Wei, X. Peng, Appl. Phys. Lett. **104**, 251915 (2014)
66. P. Xu, Z. Yu, C. Yang, P. Lu, Y. Liu, H. Ye, T. Gao, Superlattices Microstruct. **75**, 647 (2014)
67. J.W. Jiang, Nanotechnology **26**, 315706 (2015)
68. Z. Zhang, Y. Yang, E.S. Penev, B.I. Yakobson, Adv. Funct. Mater. **27**, 1605059 (2017)
69. H. Feng, J. Ma, Z. Hu, J. Mater. Chem. **20**, 1702 (2010)

Cite this article as: Mohamed Saaoud, Kawtar Sadki, Lalla Btissam Drissi, Faycal Djeflal, Mechanical response of η -layered borophene: Impact of strain, temperature, vacancies and intercalation, Eur. Phys. J. Appl. Phys. **90**, 30401 (2020)

3 Contrainte de traction ultime via des configurations pores/fissures auxiliaires

Dans le but d'évaluer l'effet de la combinaison des fissures-pores et des fissures principales-auxiliaires sur la résistance à la rupture des nanofeuilles d'InTe, quatre configurations sont construites comme suit : quatre pores ou quatre fissures auxiliaires sont introduits symétriquement à différentes positions de chaque côté de la fissure principale qui reste fixée au centre de la feuille (voir figure IV.27). Sachant que les tailles de la fissure principale et des fissures auxiliaires sont de 4.4 nm tandis que le diamètre du pore est de 1.3 nm.

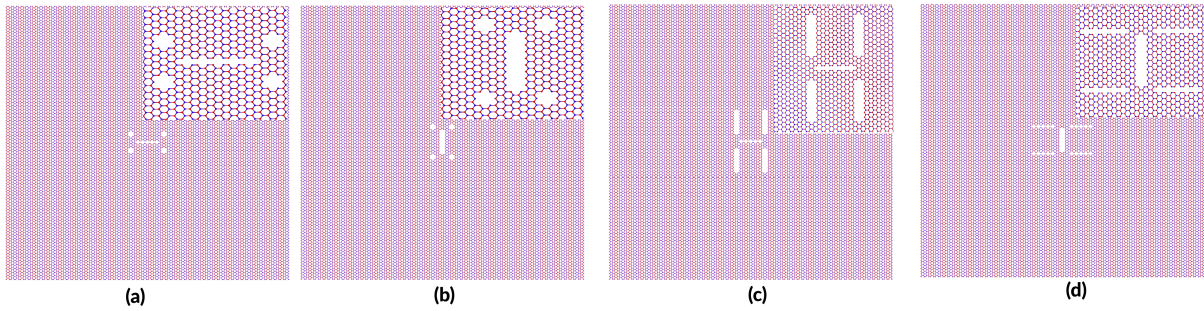


FIGURE IV.27 – Structure atomique typique d'une monocouche d'InTe.
(a) fissure en armchair avec pores (b) fissure en zigzag avec pores (c)
fissure en armchair avec fissures auxiliaires (d) fissure en zigzag avec
fissures auxiliaires.

3.1 Amélioration des fissures

Selon la position des pores autour de la fissure centrale, la rupture de la structure peut être amplifiée ou protégée. Les figures IV.27 (a) et (b) montrent des feuilles d'InTe contenant une fissure centrale avec quatre pores en interaction autour d'elle. La figure IV.28 montre la variation de la contrainte ultime pour différentes positions de pores autour de la fissure centrale pour des conditions de chargement en zigzag et en armchair à des températures de 1K et 300K. Il est évident que pour une charge en zigzag et en armchair, l'effet du pore sur la résistance à la rupture pour la position 3 et 1 du pore est presque négligeable, respectivement. Alors que l'amélioration (la détérioration) de la résistance peut être observée à la position de pore 2 (position 4) pour les deux directions. Pour mieux comprendre la raison de la variation de la contrainte ultime de la feuille, nous comparons la distribution des contraintes de la feuille pré-fissurée sans pore et avec pore à différentes positions pour les directions de chargement en zigzag (à 6.5% de déformation) et en armchair (à 5% de déformation), comme le montrent les Fig.

IV.29 (a) et (b), respectivement. Les figures IV.29(a)(i) et IV.29(b)(i) indiquent que la concentration de contraintes près de la pointe de la fissure est la principale raison de la rupture de la feuille d'InTe pré-fissurée. De plus, les figures IV.29(a)(iv) et IV.29(b)(ii) corroborent l'affirmation selon laquelle la position des pores 3 et 1, respectivement, a un effet négligeable sur la résistance à la rupture car elle ne joue aucun rôle dans la modification de la distribution des contraintes à proximité de la région de la pointe de la fissure. Par conséquent, la pointe de la fissure reste soumise à une contrainte comme dans le cas sans pores, et la fracture s'amorce avant même que les pores ne soient soumis à une contrainte. L'effet de protection contre les fissures attribué à la présence de pores a été examiné et représenté sur les figures IV.29(a)(iii) et IV.29(b)(iii). Le champ de contrainte près de la pointe de la fissure avec des pores est distribué sur un large domaine autour des pores (plus important que dans le cas IV.29(a)(ii) et IV.29(b)(iv)), ce qui entraîne une diminution de la contrainte moyenne près de la pointe de la fissure, activant ainsi le mécanisme de protection de la fissure [60, 69]. Pour la position de pore 4 dans la Fig. IV.29(a)(v), et IV.29(b)(v), la contrainte moyenne de la feuille augmente en raison de l'éloignement des pores sollicités qui ajoutent une contrainte supplémentaire à celle de la pointe de la fissure, ce qui entraîne un effet d'amplification de la contrainte [32, 39, 40] et l'apparition d'une rupture précoce. Nous avons observé que tous les pores au-delà de la position 4 affaiblissent la résistance du matériau [60, 69, 70].

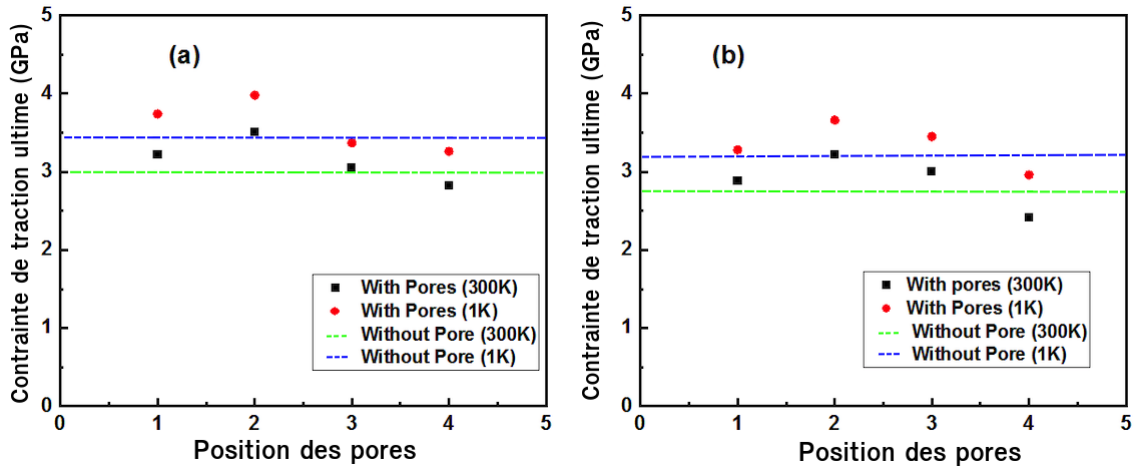


FIGURE IV.28 – Amélioration des fissures avec la coopération des pores
(a) chargement le long de la direction zigzag (b) chargement le long de la direction de l'armchair.

Pour étudier l'effet des fissures auxiliaires sur la propagation de la fissure principale sous une charge de traction, des fissures auxiliaires sont introduites autour de la fissure centrale. L'orientation de la fissure auxiliaire est maintenue perpendiculaire à la fissure principale ou parallèle à la condition de chargement. La longueur des fissures auxiliaires

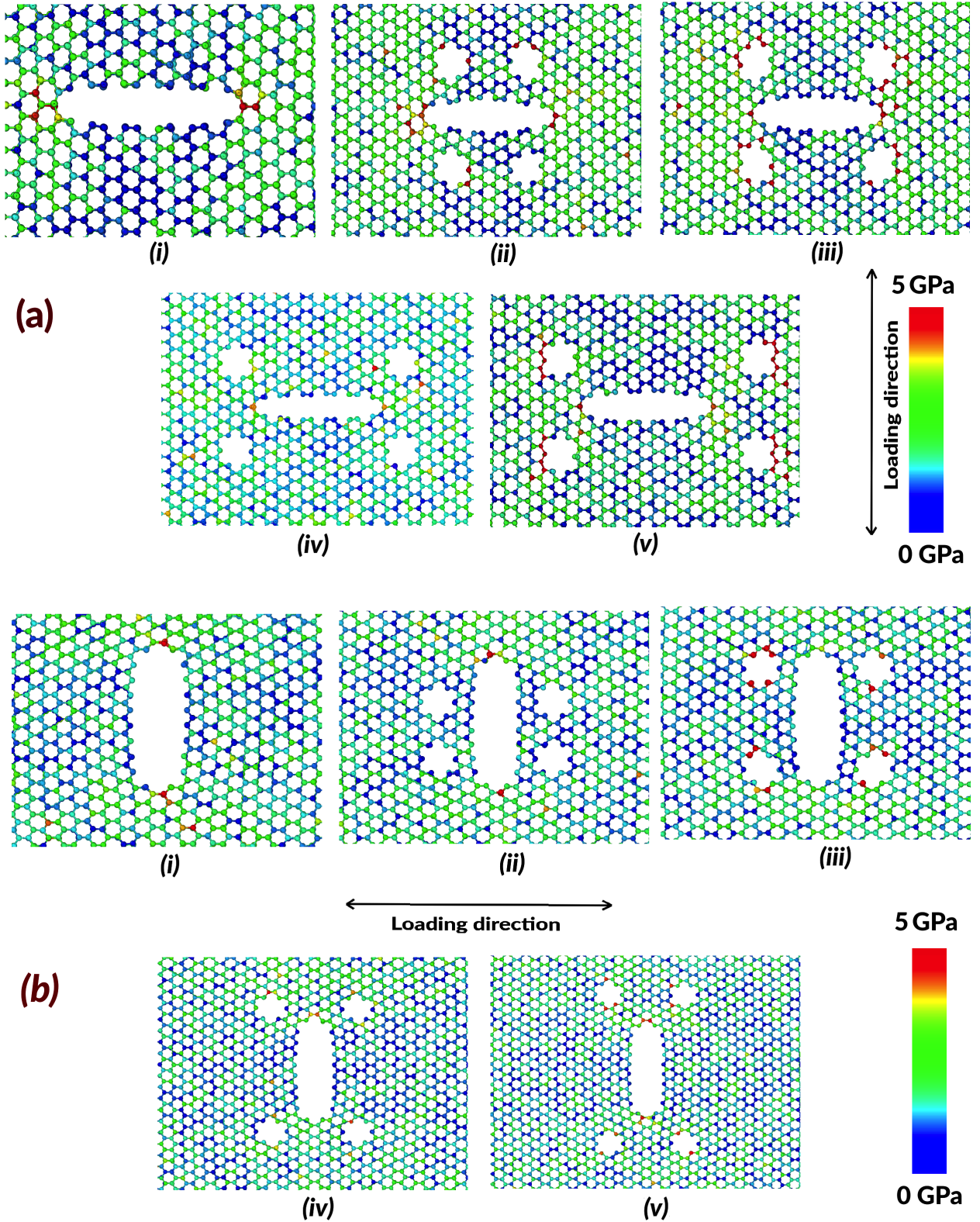


FIGURE IV.29 – Distribution des contraintes (a) pour une charge le long de la direction en zigzag (i) fissure seulement (ii) position du pore 1 (iii) position du pore 2 (iv) position du pore 3 (v) position du pore 4 à une déformation de 6.5% et (b) pour une charge le long de la direction en armchair (i) fissure seulement (ii) position du pore 1 (iii) position du pore 2 (iv) position du pore 3 (v) position du pore 4 à une déformation de 5%.

est identique à celle de la fissure principale (4.4 nm). Pour différents échantillons avec des fissures principales en armchair et en zigzag, le centre des fissures auxiliaires est d'abord placé à différentes positions le long de la direction de la fissure et à une position transversale fixe. Pour les échantillons 1-4, les fissures auxiliaires sont positionnées de plus en plus vers les extrémités des fissures. Les résultats (Fig. IV.30) indiquent que la position 1 (pour la fissure principale en armchair) et la position 2 (pour la fissure principale en zigzag) sont supérieures avec une résistance mécanique améliorée en considérant toutes les positions de la fissure auxiliaire. Pour le chargement dans la direction armchair, l'amélioration des propriétés mécaniques s'avère être due au mécanisme de protection contre les fissures (voir Fig. IV.31). En présence de fissures auxiliaires parallèles à la direction de chargement, une région non contrainte est créée près de la pointe de la fissure en raison du parallélisme avec la direction de chargement. Cette région non contrainte, lorsqu'elle est superposée avec la région contrainte près du fond de fissure principal correctement, réduit la contrainte près du fond de fissure principal. En conséquence, lorsque la fissure auxiliaire s'éloigne de la position 2 dans la direction $\pm Y$ (par rapport à la position 2), la région non contrainte se déplace également et donc l'effet d'amplification de la fissure augmente progressivement (voir positions 3, 4 Fig. IV.31-b) .

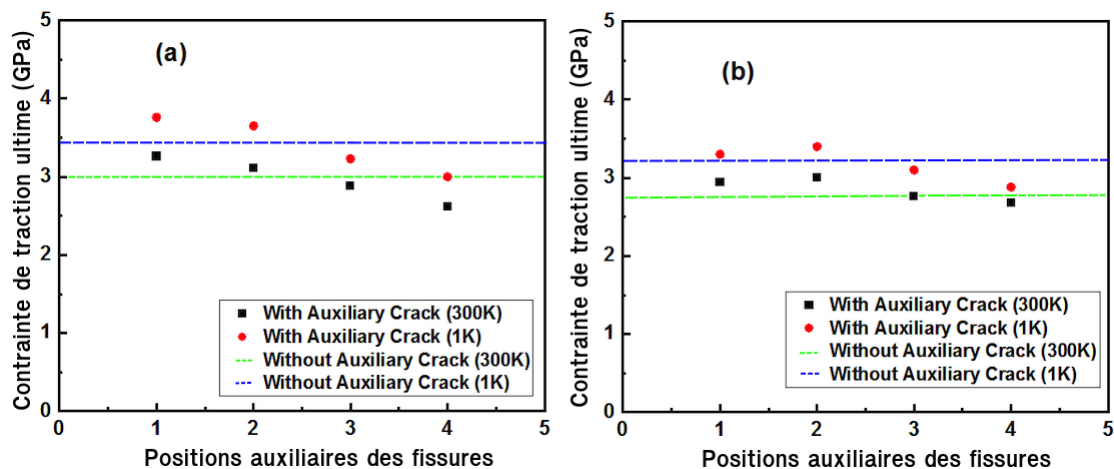


FIGURE IV.30 – Amélioration des fissures avec la coopération de fissures auxiliaires (a) chargement dans la direction zigzag (b) chargement dans la direction armchair.

Pour les conditions de chargement en zigzag, la protection contre les fissures se produit en raison du phénomène de rotation de la liaison à la pointe de la fissure. La figure IV.32 montre la rotation des liaisons avant la rupture près de la pointe de la fissure primaire en raison de la présence de fissures auxiliaires à différentes positions le long de la fissure primaire. En présence de fissures auxiliaires, les liaisons près de la pointe de la fissure ont tendance à tourner avant de s'étirer, ce qui retarde l'atteinte de la longueur

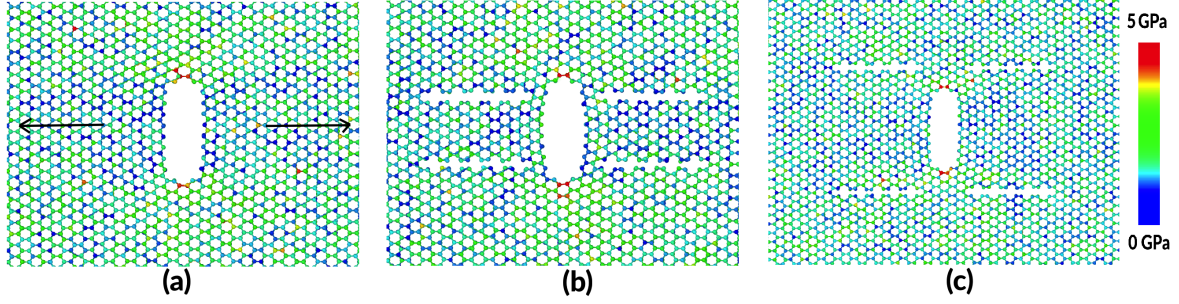


FIGURE IV.31 – Distribution des contraintes pour un chargement le long de la direction armchair (a) fissure uniquement (b) position de fissure auxiliaire 2 (c) position de fissure auxiliaire 4 à 5.5 % de déformation. Les flèches indiquent le sens de chargement.

de liaison critique. Nous supposons que les atomes pendants aux extrémités des fissures auxiliaires favorisent ces degrés de liberté supplémentaires. Par conséquent, les liaisons nécessitent plus d'énergie pour commencer l'étirement par rapport à la condition où l'étirement se produit en l'absence de fissures auxiliaires. Cependant, les déplacements atomiques aux extrémités sont dirigés vers la direction du chargement, ce qui permet ce phénomène de rotation des liaisons [60, 69], qui se produit uniquement dans le cas d'un chargement en zigzag.

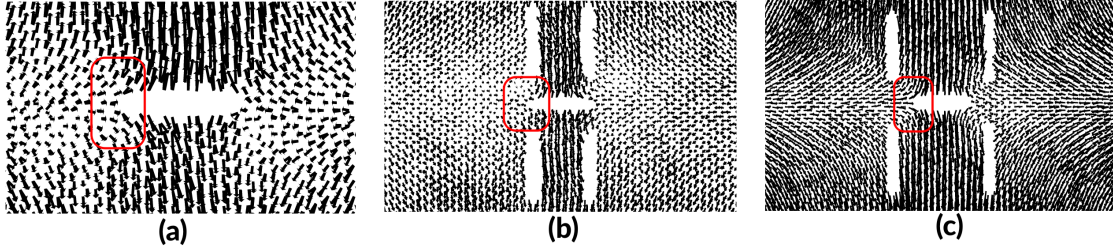


FIGURE IV.32 – Vecteurs de déplacement des atomes autour de la pointe de la fissure avant la rupture pour une feuille d'InTe contenant (a) aucune fissure auxiliaire, (b) une fissure auxiliaire en position 2 (c) une fissure auxiliaire en position 4. Les cases de couleur rouge montrent que pour (a) et (c), les mouvements atomiques à l'extrémité gauche de la fissure font un angle avec la direction de la charge, ce qui empêche la rotation de la liaison, tandis que pour (b), les déplacements atomiques font un angle plus grand que ceux de (a) et (c) (presque parallèle) avec la direction de la charge, ce qui permet la rotation de la liaison à l'extrémité de la fissure.

3.2 Comparaison entre les techniques d'amélioration

Pour une comparaison délicate entre l'amélioration apportée par les fissures auxiliaires et les pores autour de la fissure principale, la figure IV.33 illustre la résistance

à la traction ultime la plus élevée des pores et des fissures auxiliaires à leurs positions optimisées. Il est évident que l'amélioration de la résistance en présence de pores est plus importante que celle en présence de fissures auxiliaires. La résistance à la traction ultime moyenne de l'InTe pré-fissuré a montré une amélioration d'environ 8 % pour la configuration fissure principale-fissure auxiliaire et de 15 % pour la configuration fissure-pore, compte tenu de la différence de direction et de température. L'augmentation est similaire à celle de MoS_2 et faible par rapport à celle du graphène, dans laquelle 15% pour la combinaison fissure-pore pour MoS_2 [60] et atteint un maximum de 67% pour le graphène [70]. Les zones de moindre contrainte proches de la pointe sont plus espacées en cas de fissure auxiliaire que de pores. En conséquence, la fissure principale avec des pores montre sa proximité avec les zones de moindre contrainte par rapport aux fissures auxiliaires. Plus intéressant, même si les pores ont une concentration de contraintes plus faible que les fissures auxiliaires, ils peuvent contribuer à une contrainte ultime plus élevée.

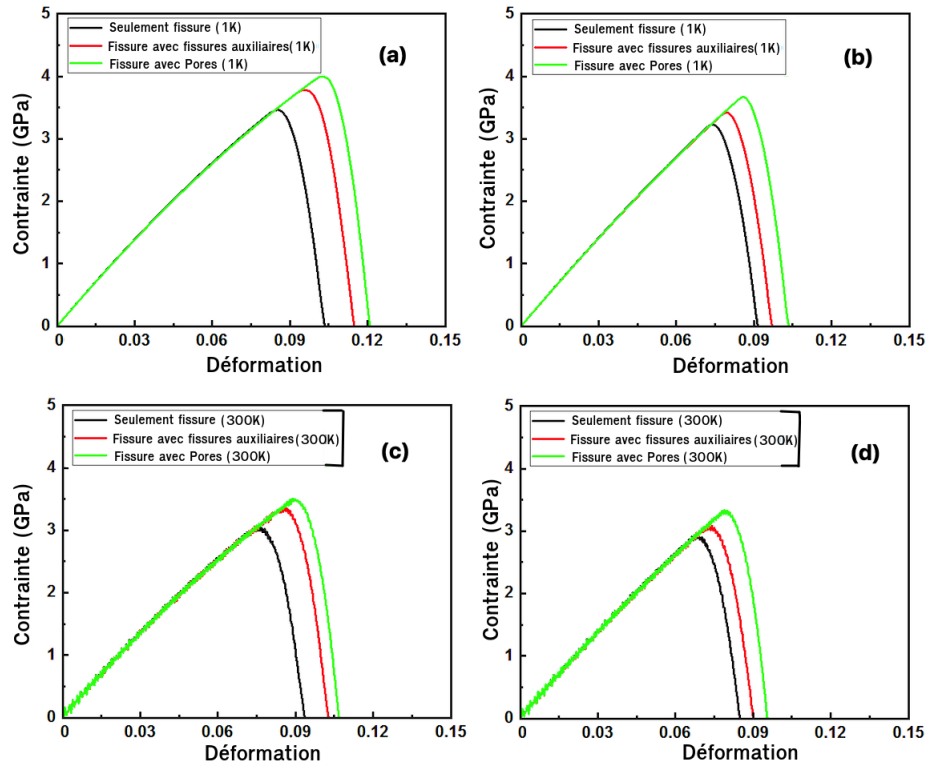


FIGURE IV.33 – Les courbes contrainte-déformation pour la comparaison entre le système fissure-pore et fissure-fissure auxiliaire pour (a) chargement dans la direction zigzag à 1K (b) chargement dans la direction armchair à 1K (c) chargement dans la direction zigzag à 300K (d) chargement dans la direction armchair à 300K.

3.3 Contributions III et IV

Contribution III

Réponse thermo-mécanique de l'oxyde de bore hexagonal 2D parfait et défectueux

Résumé

Récemment, les matériaux chalcogénures bidimensionnels du groupe III ont constitué un sujet de recherche d'actualité compte tenu des propriétés intéressantes qu'ils présentent et qui les rendent des candidats prometteurs pour diverses applications et dispositifs émergents. Cependant, malgré les nombreux efforts consacrés à l'exploration des caractéristiques physiques de la famille $M^{III}X^{VI}$, les propriétés mécaniques, le comportement thermique et le mécanisme de rupture restent inexplorés pour le premier élément de cette famille, à savoir la monocouche BO.

Motivé par le module de Young élevé de l'oxyde de bore (BO) par rapport à ses pairs d'une part, et d'autre part en raison de sa structure ondulée, qui fait que la déformation mécanique s'adapte efficacement à ses propriétés intrinsèques, ce qui peut servir de candidat prometteur pour concevoir des nanodispositifs avancés. Dans ce travail, nous nous intéressons à l'étude des propriétés mécaniques des monocouches de BO parfaites et défectueuses qui n'ont pas encore été explorées dans la littérature. Notre résultat montre que la monocouche BO est plus flexible à la déformation mais qu'elle est plus difficile à casser par rapport à d'autres matériaux hexagonaux bidimensionnels. Il est également démontré que les propriétés de traction sont très sensibles à la température le long des directions armchair et zigzag. De plus, des fissures de longueurs différentes ont un impact considérable sur le comportement à la rupture de la nanofeuille BO, alors que l'allongement des fissures n'a aucune influence sur le module de Young. Pour les nano-fissures, la limitation de la pertinence du critère de Griffith pour la feuille BO, par rapport aux simulations MD, est mise en évidence. Les défauts de mono et bi-lacunes, disposés perpendiculairement à la direction de chargement, influencent fortement la réduction de la résistance à la rupture. Cette étude illustre la monocouche de BO comme un matériau potentiel pour une utilisation dans des applications extensibles et dans de futurs dispositifs thermomécaniques.



Thermo-mechanical response of pristine and defective 2D hexagonal boron oxide

Mohamed Saaoud^a, Kawtar Sadki^{a,b}, Lalla Btissam Drissi^{a,b,c,*}, Mahmoud Abdel-Hafiez^d

^a LPHE, Modeling & Simulations, Faculty of Science, Mohammed V University in Rabat, 1014 RP, Rabat, Morocco

^b CPM, Centre of Physics and Mathematics, Faculty of Science, Mohammed V University in Rabat, 1014 RP, Rabat, Morocco

^c College of Physical and Chemical Sciences, Hassan II Academy of Sciences and Technology, Km 4, Avenue Mohammed VI, Rabat, Morocco

^d Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, Uppsala, Sweden

ARTICLE INFO

Keywords:

BO monolayer
Molecular dynamics
Temperature and Pre-crack
Griffith criterion
Vacancy defect
Mechanical properties

ABSTRACT

Understanding the fundamental properties in two-dimensional group-III chalcogenides materials and the development of methods to characterize and control their collective behavior is a topical area that attracts enormous interest. In this work, using molecular dynamics simulations, we report on the effect of temperature, crack length and point defects on the tensile properties of the BO monolayer. BO monolayer is found to be more flexible to deform but it is harder to break compared to other two-dimensional hexagonal materials. It is also demonstrated that the tensile properties are very sensitive to temperature along the armchair and zigzag directions. Furthermore, cracks at different lengths considerably impact the fracture behavior of the BO nanosheet, whereas crack elongation has no influence on Young's modulus. For nano-cracks, the limitation of the relevancy of Griffith's criterion for the BO sheet, with respect to MD simulations, is highlighted. Mono- and bi-vacancy defects, patterned perpendicular to the loading direction, greatly influence the reduction of the fracture strength. This study illustrates BO monolayer as a potential material for use in stretchable applications and in future thermo-mechanical devices.

1. Introduction

Recent interesting research on graphene and its analogous silicene, germanene and stanene [1–5], has broadened the spectrum of two-dimensional (2D) hexagonal materials. Therefore studies have been abundantly conducted for mono-element sheets [6–9], hybrid monolayers [10–13], few-layered systems [14–17], and vertical or lateral heterostructures [18–21]. In particular, group III–VI binary compounds have attracted increasing interest owing to their special optoelectronic properties such as high carrier mobility, high charge density and p-type electronic characteristic [22–24]. Due to their buckled structures, mechanical deformation effectively adapts their intrinsic features, which may serve as a promising candidate to design advanced nanodevices.

To date, various hexagonal group III–VI compounds $M^{III}X^{VI}$ including GaS [25,26], GaSe [27], GaTe [28] and InSe [29] have been synthesized experimentally. Among this class, the 2D InSe has been demonstrated to have a remarkable tensile strain of 27% along the zigzag direction for a room temperature of 300 K besides a significant decrease in its mechanical parameters as the temperature increases [30]. Thermal conductivities (k) of InSe at 300 K of an infinite length are $46.18 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ and $45.87 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ along the armchair and zigzag directions, respectively. Furthermore, the InSe length

augments the value of k , while the rise of temperature and vacancy defect decreases it [31]. A comparative study of GaS, GaSe, and GaTe nanosheets stated a high Young's modulus (173 GPa) for GaS compared to 82 GPa and 24 GPa for GaSe and GaTe, respectively [32]. Additionally, these materials can withstand maximum stress and strain of up to 8 GPa and 7%, accordingly, before fracturing [32]. They also demonstrate a significant ductility with respect to graphene and MoS_2 as well as a strong increase in their flexibility due to the repulsive interactions between the extra charges located on the chalcogen atoms [33].

Interestingly, the family of $M^{III}X^{VI}$ monolayers (where $M = \text{B, Al, Ga, In}$ and $X = \text{O}$) exhibits a different electronic structure from the rest of the two-dimensional group-III chalcogenides due to the high electronegativity of its oxygen atoms, also structural optimization computations and phonons spectrum investigations indicate their significant thermal stability [34]. However, despite the many endeavors devoted towards exploring the physical characteristics of the $M^{III}X^{VI}$ family, the mechanical properties, thermal behavior and failure mechanism remain unexplored for the first element of this family, namely the BO monolayer. Indeed, there are very rarely investigations in the literature reporting the mechanical properties of the BO compound and

* Corresponding author at: LPHE, Modeling & Simulations, Faculty of Science, Mohammed V University in Rabat, 1014 RP, Rabat, Morocco.
E-mail addresses: lalla-btissam.drissi@fsr.um5.ac.ma, b.drissi@academiesciences.ma (L.B. Drissi).

almost no study is available concerning its behavior under strain at various temperature, which makes its study of an important necessity for mechanical applications in nanodevices.

Moreover, unlike most of its counterparts, the experimental realization of the BO nanosheet has not yet been carried out. In the meantime, recall that, in 2D materials, the growth and evolution of defects is inevitable during the manufacturing process. To deal with the influence of these defects on the properties of the nanosheets, two main ways are employed: (i) engineer the defects to minimize such damages provoked, and (ii) introduce defects into the structure in order to manipulate the desired properties [35–37]. In this regard, the molecular dynamics (MD) simulation is considered to be one of the useful methods to control the crack behavior and keep all the features of the material at the nanoscale [38–40].

Motivated by the interesting results reported for certain elements of the $M^{III}X^{VI}$ family, as well as by the success of the 2D hexagonal graphene-like structure for nanotechnological applications, this work contributes to study the mechanical properties of pristine and defective BO monolayers not yet explored in the literature. By performing MD simulations, which have a profound advantage over first-principles calculation methods for calculations where the size of the system is considered [41], the effect of temperature and structural defects on the mechanical characteristics of the BO monolayer is determined. Young's modulus, fracture strength and strain are discussed in the presence of a temperature ranging from 1 to 900 K, a crack-length varying from 1.5 to 4 nm, and a 0.1 to 2% vacancy concentration. Moreover, the fracture mechanism of the pristine and pre-cracked BO monolayer is also probed. This paper is organized as follows: Section 2 provides a detailed analytical framework of the molecular dynamics simulations. The results are presented and discussed in Section 3.

2. Framework for analysis

Herein, we conducted the molecular dynamics simulations used the Large Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) software package [42]. To describe the interatomic interactions among the atoms of monolayer BO, the potential of Stillinger–Weber (SW) is chosen [43]. A structure of dimension 25.3 nm × 24.4 nm is employed, containing 48 000 atoms in its pristine form. The thickness has been assumed to be 0.832 nm. Pre-cracks are introduced by removing a line of atoms in the center of the sheet in a direction perpendicular to loading orientation as depicted in Fig. 1. Notice that the minimum dimension (either length or width) of nano-sheet must be at least ten times the half crack length, to avoid size effects of finite dimension [44,45]. Therefore, pre-cracks lengths are (approximately ~1.5 nm, ~2.4 nm, ~3.2 nm and ~4 nm). The point defects (mono- and bi-vacancy) are created and distributed with an appearance perpendicular to loading direction, from 0.1% up to 2% of the total atoms.

The simulations are accomplished with temperatures between 1 to 900 K. To avoid the finite-length effect, a periodic boundary condition is applied in both planar directions along the loading direction, and during the simulation process. In all the simulation cases, initially, the structure is relaxed using Nose–Hoover barostat (NPT) ensemble for 0.5 ns at a specific constant temperature and pressure of 0.1 ps and 1 ps, respectively, with a time step of 0.001 ps to avoid discretization errors. Then the system is subjected to tensile load at a constant axial strain rate of $4 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ for 0.5 ns. Recall that the high range of strain rate is routinely used by many modern studies [46–50]. The stress values of each atom during deformation resulting from the tensile load are obtained according to [46]:

$$\sigma_{\text{virial}} = \frac{1}{\Omega} \sum_i \left(-m_i \dot{u}_i \otimes \dot{u}_i + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} r_{ij} \otimes f_{ij} \right) \quad (1)$$

In the above equation, the summation is over all the atoms occupying the total volume, m_i represents the mass of atom i , $\dot{u}_i$ is the time derivative defining the displacement of an atom with respect to a

reference position, while r_{ij} is the position vector of an atom, f_{ij} is the interatomic force applied on atom i by atom j , and $\otimes$ symbol represents the cross product.

The engineering strain in these simulations can be expressed as follows:

$$\varepsilon = \frac{L - L_0}{L_0}, \quad (2)$$

where L_0 is the original length and L presents the strained length of the simulation box.

The formation energy of the vacancies is presented as follows [51, 52]:

$$E_{\text{vacancies}}^{\text{Form}} = E(n, n_v) - \frac{(n - n_v)}{n} E_{\text{perfect}}, \quad (3)$$

where $E(n, n_v)$ is the total energy of the defective BO sheet, n is the total number of atoms, n_v is the number of atoms deleted from the pristine form and E_{perfect} is the total energy of the perfect BO. Young's modulus Y_s is obtained by fitting the stress–strain curve using linear regression on initial linear portion (strain $\leq 1\%$).

According to the Griffith theory of brittle failure [53], the fracture strength σ_f is expressed in terms of Young's modulus as follows [54]

$$\sigma_f = \sqrt{\frac{2\gamma Y_s}{\pi a_0}} \quad (4)$$

where a_0 is the initial crack length, γ is the surface energy for 3-D materials and edge energy for 2-D materials. The surface energy is determined from the potential energy per bond at 0 K. By employing the following equation:

$$\gamma = \frac{PE_{\text{bond}}}{2t\Delta L} \quad (5)$$

where, PE_{bond} is the bond energy, t is the sheet thickness, and ΔL is the crack length stretch due to bond breaking. ΔL is considered respectively, fit to $1.5r_p$ and $\sqrt{3}r_p$ for zigzag and armchair loading condition [55], with

$$r_p = \sqrt{r^2 - h^2} \quad (6)$$

where r and h denotes respectively, the bond length and the buckling height at 0 K.

3. Results and discussion

In this section, Young modulus, stress, strain, fracture mechanism are determined and discussed for pristine and pre-cracked BO monolayers in the absence and the presence of different types of defects, including mono-vacancy and bi-vacancy with varying concentrations.

The atomic structure of BO nanosheet displays the honeycomb array in the xy plane, which is formed by a covalent bond between B and O atoms as portrayed in Fig. 2(a). The BO monolayer consists of four sublayers stacked in the sequence of O–B–B–O, the covalent bond B–B is perpendicular to the surface. The x -axis and y -axis correspond to the armchair and zigzag directions, respectively. By implementing SW potential, the four relaxed, independent geometrical parameters are $a=2.44 \text{ \AA}$, $d_{B-O}=1.52 \text{ \AA}$, $d_{B-B}=1.77 \text{ \AA}$ and $d_{O-O}=2.912 \text{ \AA}$, which are the lattice constant, the bond lengths of B–O bonds, B–B bonds and O–O bonds, respectively. The buckling parameter is $0.57 \text{ \AA}$, and it is between two different atoms of two successive sublayers. Thus, experimental data indicates that MX systems are growing in “bilayer” structure. Our results are in excellent conformity with the existing literature [34].

First, we establish the validity of our approach by reproducing the stress–strain curves of BO monolayer at 1 and 300 K. Notice that these two temperatures are routinely used in the typical atomistic simulations in order to validate the SW approach [37,56,57]. Fig. 3 shows that, the stress increases linearly with increasing uniaxial strain along the x (armchair) and y (zigzag) directions. Up to 3%, BO monolayer exhibits

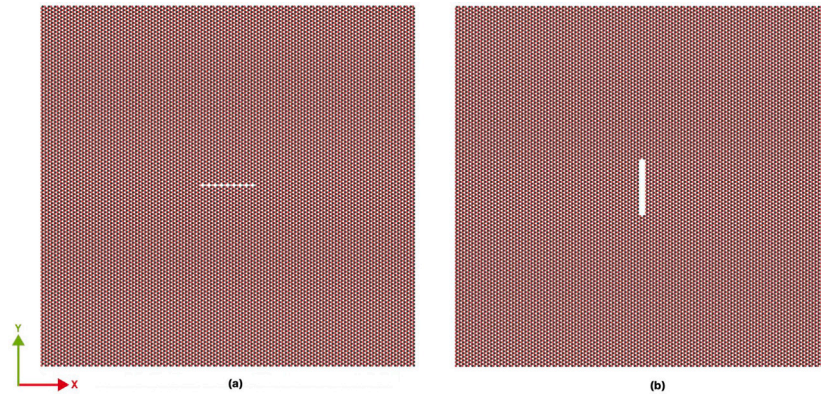


Fig. 1. Initial coordinates of pre-cracked monolayer BO. (a) Crack in the armchair direction. (b) Crack in the zigzag direction.

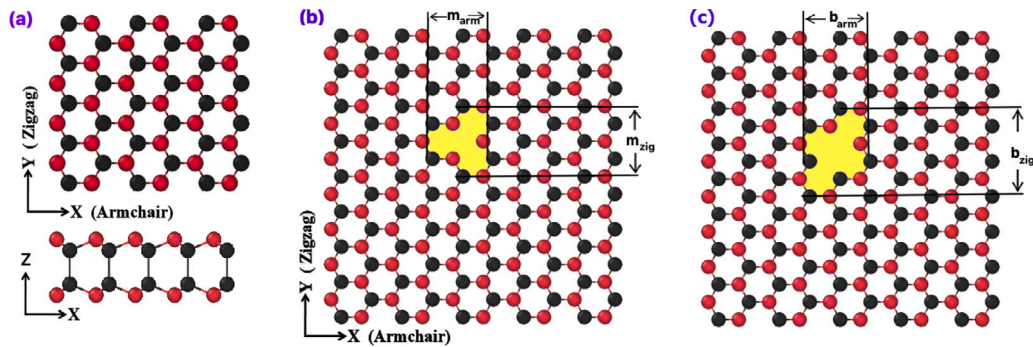


Fig. 2. (a) Top and side view of atomic structure of monolayer BO. The black and red balls denote B and O atoms, respectively, (b) mono-vacancy and (c) bi-vacancy defective monolayer BO, where m_{zig} and m_{arm} are the defect width of the mono-vacancy, while b_{zig} and b_{arm} are those corresponding to bi-vacancy.

Table 1

Calculated Young's modulus Y_c ; Fracture strength and strain of monolayer BO at 1 K and 300 K along zigzag/armchair directions for asymmetric materials. Results of some hexagonal 2D materials are given for comparison. Cited results from Refs. [34,62] are found at 0 K, while the others are given at 300 K.

Sheet type	Young's modulus (N/m)	Fracture strength (N/m)	Fracture strain (%)
BO ^{This study} 1 K	302.8/305.5	56/58	24.7/19.4
300 K	300.8/301.18	~44	13.38–11.67
BO [34]	350	–	–
InSe [30]	44.8–45.7	8.3–8.6	26.86–24.45
MoS ₂ [37]	~97.4–96.4	~6.9–8.1	9.8–12.3
Graphene [62]	350	39.5	~20
β -bismuthene [58]	25.5–26.1	4.22–4.21	25.5–19.5
Borophene [59]	~167/393	~10/26	11.24–9.87
Phosphorene [63]	~47/11	~2.3/1.3	6–13

a linearly elastic response in agreement with buckled hexagonal monolayers like bismuthene, borophene and phosphorene [58–60]. Beyond this range, the stress continued increasing non-linearly up to ultimate tensile stress point and then decreases drastically, inferring the system could undergo structure failure with a brittle-type failure, as reported for other 2D hexagonal materials including silicene, InSe, graphene [40], and h-BN [30,40,61].

At 1 K, our MD simulations reveal the values of 302.8 N/m and 305.5 N/m for Young's modulus along the zigzag and armchair direction of BO monolayer respectively, which concord well with 299.6 N/m and 297.7 N/m reported in [43] at the same temperature and along the same directions, respectively. Notice that DFT calculations report a Young's modulus of 350 N/m for BO [34]. When increasing T to 300 K, the Young's modulus slightly decreases as listed in Table 1. The fracture stress and strain obtained in Fig. 3 and reported in Table 1 are in agreement with the previous literature [43] using MD calculations and

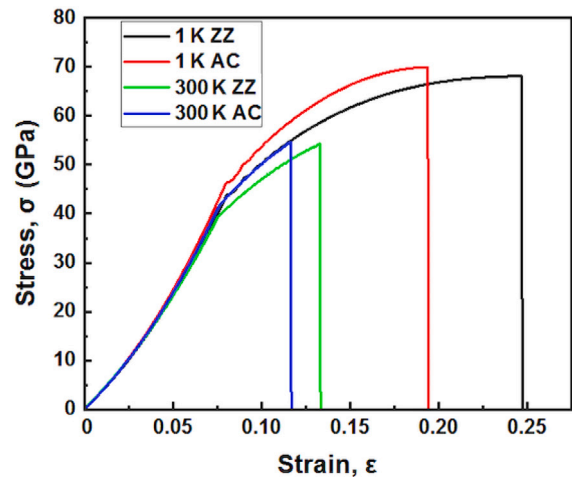


Fig. 3. The stress–strain curves of monolayer BO sheet under uniaxial tension deformation along the armchair and zigzag directions at temperatures 1 K and 300 K.

not considering the thickness of the sheet. More results using the SW potential for predicting the mechanical properties of other 2D materials such borophene [49], InSe [30], MoS₂ [37], black phosphorus [64], and graphene [65] are also cited in Table 1 for comparison. It follows that BO sheet exhibits notable level of flexibility comparable to the one of planar graphene [62] and can endure higher tensile stress than other hexagonal buckled 2D materials such InSe [30], and borophene [59].

Furthermore, the fracture mechanism of the deformation process of BO sheet is displayed in Fig. 4 at 300 K. The snapshots plotted in (Fig. 4a), along the armchair (X -axis) direction, shows that as the strain

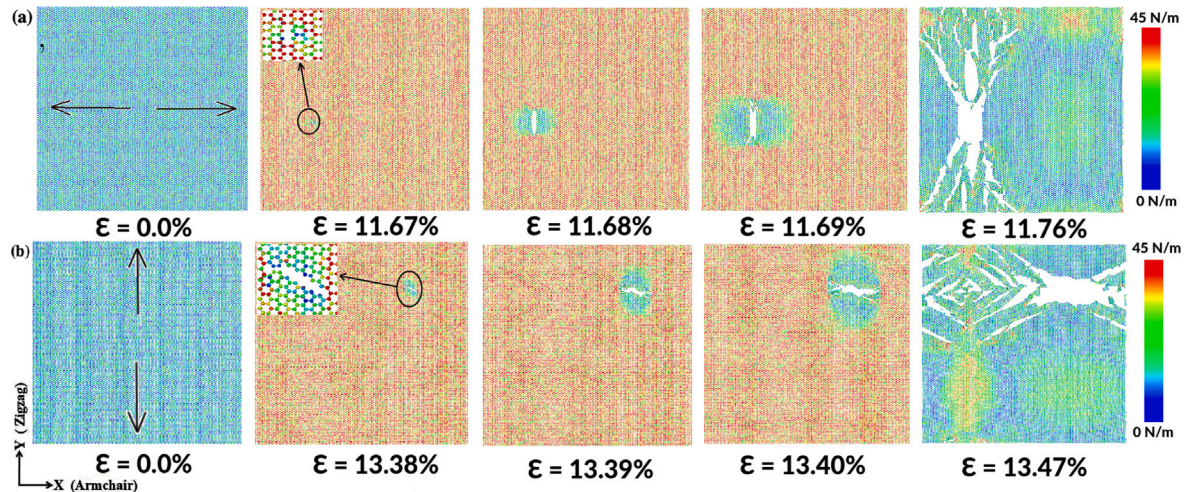


Fig. 4. Deformation process of monolayer BO sheet at 300 K under uniaxial loading in (a) the armchair and (b) zigzag orientations. The color bar shows the stress in N/m and the arrows indicate the loading direction.

increases from 0.0% to 11.67%, the stress in the BO sheet increases. The distribution of atomic stress is fairly homogeneous in the whole sheet, but as the initial void is produced by the bond break, an excessive stress concentration near the initial void is clearly observed, which corresponds to the critical strain. At the strains of 11.68% and 11.69%, the void nucleation acts like a crack and it rises spontaneously in the direction perpendicular to the loading axis. When the strain achieves 24.48%, the structure is filled by cracks then completely destroyed. In parallel, the instantaneous snapshots illustrated in Fig. 4b, shows the same mechanism for the BO sheet failure under the zigzag (Y -axis) direction. Indeed, the stress concentration observed at the void region (strain of 13.38%), is followed by crack propagation at the strains beyond 13.38% which corresponds to the critical strain. When the strain reaches 13.47% the crack bifurcates along the sheet which causes the crush. In short, regardless of the loading direction (armchair or zigzag), the nucleation of void occurs in the sheet at the early stage of fracture, then behaves like a crack and propagates along the perpendicular direction of the load up to that the sheet is show a major failure then completely damaged. This comportment is reported earlier for InSe [30,31].

The stress–strain curves for perfect BO layer, can be divided into four main regions. In the first one, the stress exhibits a linear increasing trend with the strain up to 3% due to the elastic response of the bonds. The stress exhibits a nonlinear elasticity for strain ranging from 3% to around 8%. This behavior is due to the combined effect of bond angle variation and bond elongation. When the strain exceeds 8%, a significant increases of the stress–strain region is initiated, resulting in the BO-material enters the deformation hardening stage before complete fracture strength point and finally finishes with a quick breakdown, ensuing in a brittle fracture of the sheet. The stress–strain relationship of starts by a linear correlation in a small strain region, follows by a nonlinear behavior up to the fracture strength point and finally finishes with a quick breakdown, ensuing in a brittle fracture of the sheet. It is worth mentioning that this shape of deformation action is quite different compared to some pristine 2D hexagonal materials, including AlN, BN, GaN, InN and SiC exhibiting planar lattices [66–68]. However, our finding concordes well with other MX systems that are growing in high buckled structures such as InSe, InO and InS [69,70].

3.1. Temperature's effect

In this part, we study the mechanical properties of monolayer BO in terms of temperature. Fig. 5 plots the stress–strain response of BO nanosheet at a wide range of temperatures from 1 to 900 K. At a

fixed temperature, the fracture strain is more sensitive to the loading direction compared to the fracture strength. The difference between strain values in the zigzag direction with respect to the armchair one, might be explained by the influence of bond location along the loading orientation. More precisely, when the BO sheet subjected to tensile load along the zigzag direction, it faces some horizontal bonds which can sustain a larger tensile strain before failure.

Furthermore, as summarized in Figs. 6, the fracture strength (strain) drops around 48% (60%) along armchair direction and 47% (66%) along zigzag direction when the temperature increases from 1 K to 900 K accordingly.

For Young's modulus, Fig. 7 shows its diminishment as the temperature escalates. The reduction is about $\sim 4.7\%$ along armchair direction and $\sim 4\%$ along zigzag direction for temperature ranging from 1 K to 900 K, respectively. The small difference in Young's modulus values, observed when increasing temperature, affirms the isotropy of the monolayer BO. Therefore, the temperature deteriorates the mechanical properties of monolayer BO. These deteriorations can be attributed to the chemical bonds lengths that undergo more thermal fluctuations at higher temperature which leads to the earlier break. It can also be observed that all the curves exhibit brittle type fracture.

3.2. Crack length

The effect of central crack length on the elastic parameters of monolayer BO is investigated at room temperature for a strain applied perpendicular to crack direction. According to Figs. 8, in the elastic regime, all the stress–strain curves almost overlap with each other indicating a trivial effect of the crack length on the Young's modulus along both zigzag and armchair loading. Furthermore, the Young modulus is nearly invariable along the armchair (zigzag) direction, which is 360 GPa (358 GPa), respectively.

However, when increasing the crack length in Figs. 9, the fracture strength and strain of monolayer BO diminish due to the localization of stress around the crack tip [53,71]. The reduction of fracture strength (strain) for the four specified pre-crack lengths from 1 nm to 4 nm is 43% (32%) in armchair loading, and 44% (35%) for zigzag stress, respectively. In the presence of pre-crack, the zigzag loading reveals more resilience to deformation compared to the armchair one. It is mainly owing to their crack propagation path which has been widely explored in Fig. 11 discussed below.

To check the accuracy of our calculations for fracture strength of BO monolayer with small nano-sized cracks, Figs. 10 exhibit computed fracture strength from MD simulations and Griffith theory of brittle

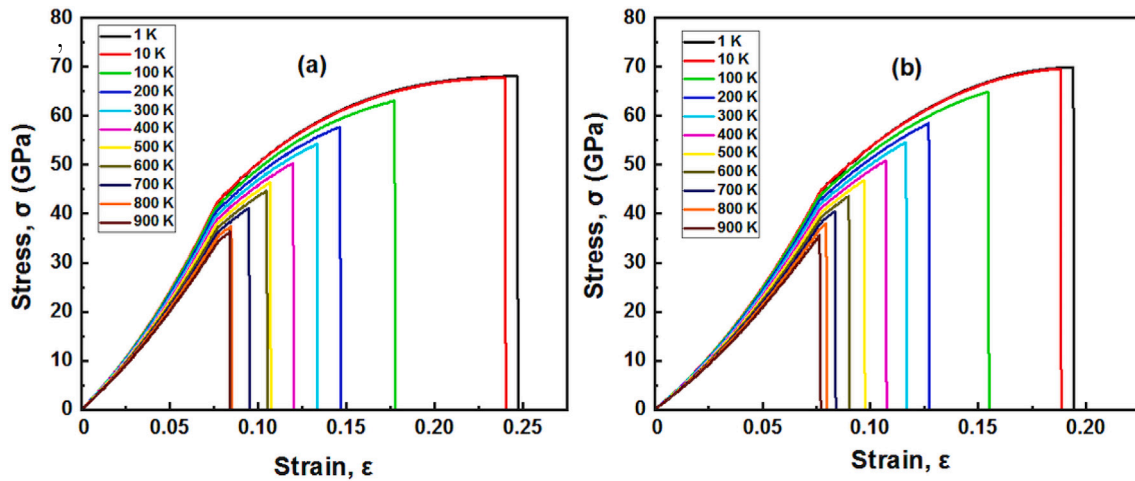


Fig. 5. Stress-strain response of BO in terms of temperature. The sheet is subjected to tension along (a) zigzag and (b) armchair directions.

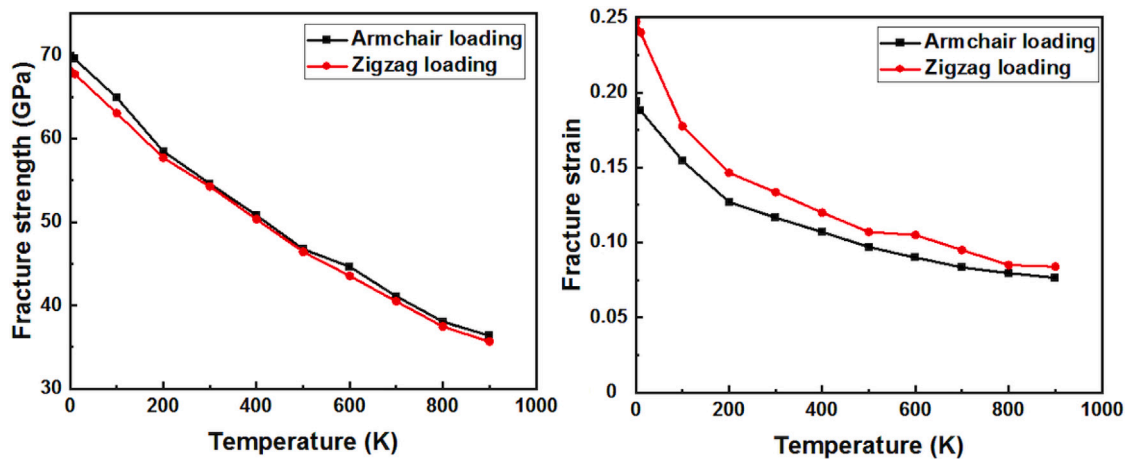


Fig. 6. Variations of fracture strength and fracture strain of monolayer BO sheet with temperature for both armchair and zigzag directional loading.

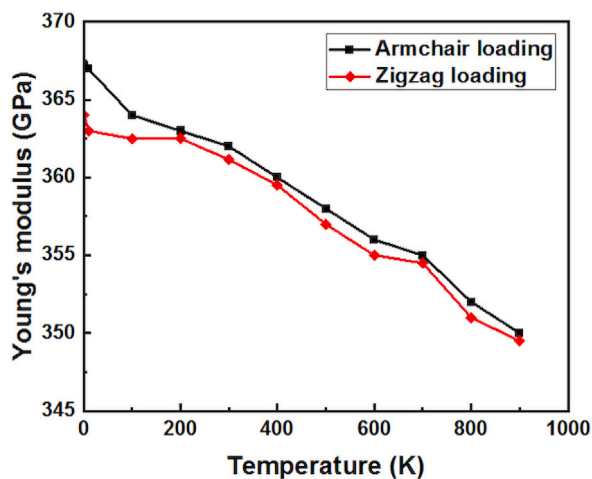


Fig. 7. Effects of temperature on Young's modulus of monolayer BO under uniaxial tension in the armchair and zigzag orientations.

fracture, respectively in zigzag and armchair directions. It is well known that Griffith's criterion of brittle fracture, based on continuum mechanics and elastic framework and very developed for bulk materials, is amongst the most paramount theories for characterizing the

mechanical behavior of defective materials [72]. Recently, it has been widely used for nanoscale materials such graphene [38,73,74]. For hexagonal BO monolayer, it is evident from Figs. 10 that the increase in crack length leads to declination of fracture strength with a difference in its magnitude that is larger at 1.5 nm and which slightly decreases at 2.5 nm in favor of data gathered from Griffith's criterion calculations with respect to MD simulations, then it becomes almost constant up the end. The substantial deviation between Griffith's prediction and MD calculations indicating the limitation of the model at the nanoscale. More precisely, due to the discrete atomic structure of BO lattice and the stretchable nature of bonds, an auxiliary energy is required to starts fracture process when MD simulations are performed. However, in the Griffith's fracture theory, the only restriction for crack propagation is the surface energy barrier. It follows that once the strain energy overcomes the surface energy, a crack begins to extend. Fig. 11 shows the fracture phenomenon of 4 nm zigzag and armchair directed pre-cracked BO sheet for various strain levels at 300 K. The loading is always applied perpendicular to crack direction, as mentioned above. The crack propagation scheme in both cases looks like analogous at first sight, but the profound examination affords that the crack propagation mechanism is different. More precisely, for zigzag crack, there are two bonds (one at each side) located at the crack tip that are perpendicular to the crack. Further loading increases the stress concentration around the crack ends, hence initiates the spread of crack. This pattern of crack is previously stated for some typical 2D materials [75–77]. However, for armchair crack in Fig. 11b, four (two at each side) symmetrically

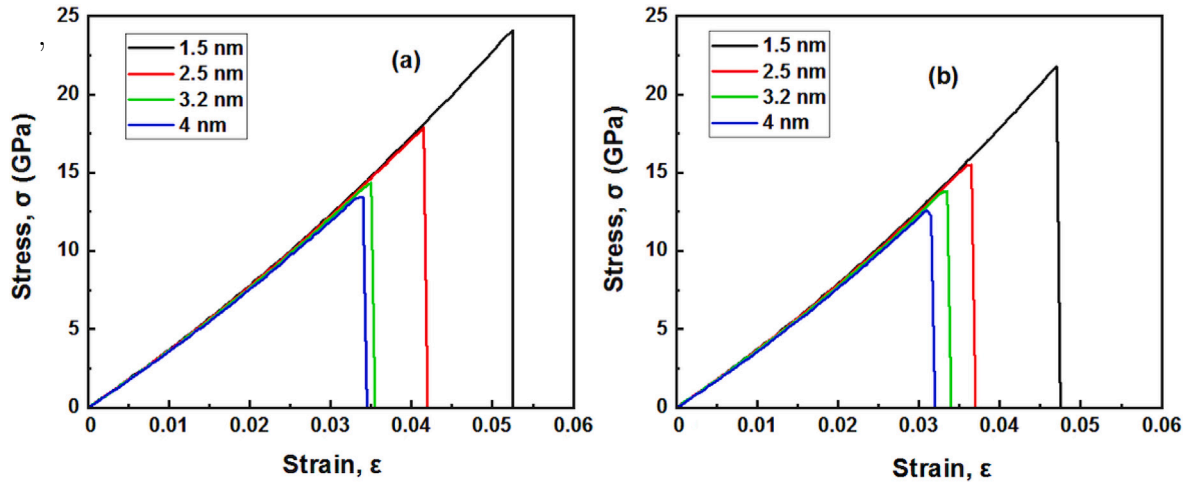


Fig. 8. Effect of crack length on the stress-strain response of BO sheet under (a) zigzag and (b) armchair loading.

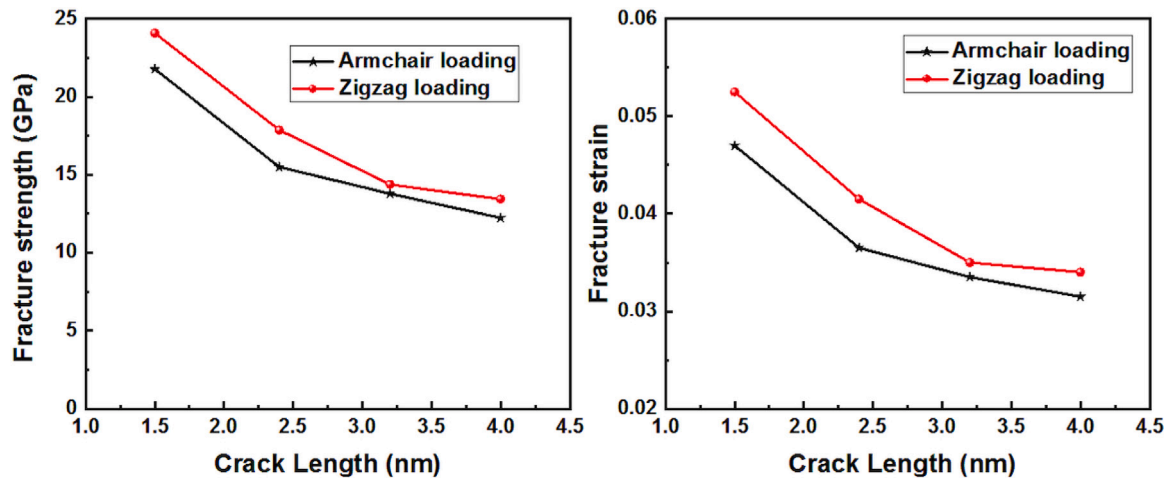


Fig. 9. Variations of fracture strength and fracture strain with the crack length of BO sheet for both armchair and zigzag directional loading.

inclined bonds are observed at the crack tip. When growing stress concentration, two possible crack propagation paths, forming an angle of $\pm \frac{\pi}{3}$ with x direction, are provided. Those branching phenomenon are clearly observed at strains of 3.51% and 3.54%. As a result, the fracture strength and strain in the armchair crack (zigzag loading) are becoming higher compared to that in the zigzag crack (armchair loading), which further justifies our aforementioned results.

3.3. Vacancy defects

Here we study the tensile properties of BO nanosheet for different types of defects, including mono-vacancy and bi-vacancy with varying concentrations under uniaxial tension. Fig. 2(b) and (c) depicts the defective monolayer BO including a mono-vacancy and bi-vacancy defect formed by removing one random atom and two nearest neighbor BO atoms respectively along zigzag direction and also in armchair axis. In all configurations, the trend of defects distribution is considered perpendicular to loading axis.

The fracture strength versus defects percentage for defective BO nanosheet plotted in Fig. 12 reveals that the increase of defects ratio is accompanied with a decline of fracture strength.

For 0.1% up to 2% mono-vacancy, the reduction of fracture strength is about 33.3% along zigzag orientation and 34% along armchair axis, while it is around 33.5% and 37.3% in the zigzag and armchair orientations, respectively for bi-vacancy case. In contrast to zigzag loading

where the decrease of fracture strength is quite insensitive to the type of vacancy defects, the bi-vacancies lead to a larger diminishing in fracture strength compared to the mono-vacancies along the armchair direction as displayed in Fig. 12(b). This result is also observed in phosphorene [63]. To shed more light on these variations, we analyze the effect of vacancy's width m_i and b_i ($i = \text{zig}, \text{arm}$) presented in Figs. 2(b) and (d). Notice that b_{zig} is larger than m_{zig} while b_{arm} is roughly equal to m_{arm} . When the BO sheet is subject to load along the armchair direction, the shrinking in the cross-sectional area by a bi-vacancy (b_{zig}) is larger than that of a mono-vacancy (m_{zig}), which elucidates larger diminishing for bi-vacancy defect. On the other hand, when the loading is along the zigzag direction, so we observed nearly same reduction in fracture strength for both mono and bi vacancy since the shrinking in the cross-sectional area by a bi-vacancy (b_{arm}) is identical to that of a mono-vacancy (m_{arm}).

Linked to impact of defects, Fig. 13 portrayed the variation of Young's modulus in terms of mono- and bi-vacancy defects percentage. The Young modulus drops as the defect concentration augment. The reduction of Young's modulus for mono-vacancy (bi-vacancy) concentration ranging from 0.1% to 2% is 2.23% (2.37%) and 2.51% (2.72%), in armchair and zigzag direction respectively. It is noteworthy that both vacancy types have almost the same diminution with a slight difference in favor of bi-vacancy due to the formation of dangling bonds near the removed atoms. According to [78,79], graphene and 2D-SiC show significant effect of single vacancy compared to bi-vacancy due to the

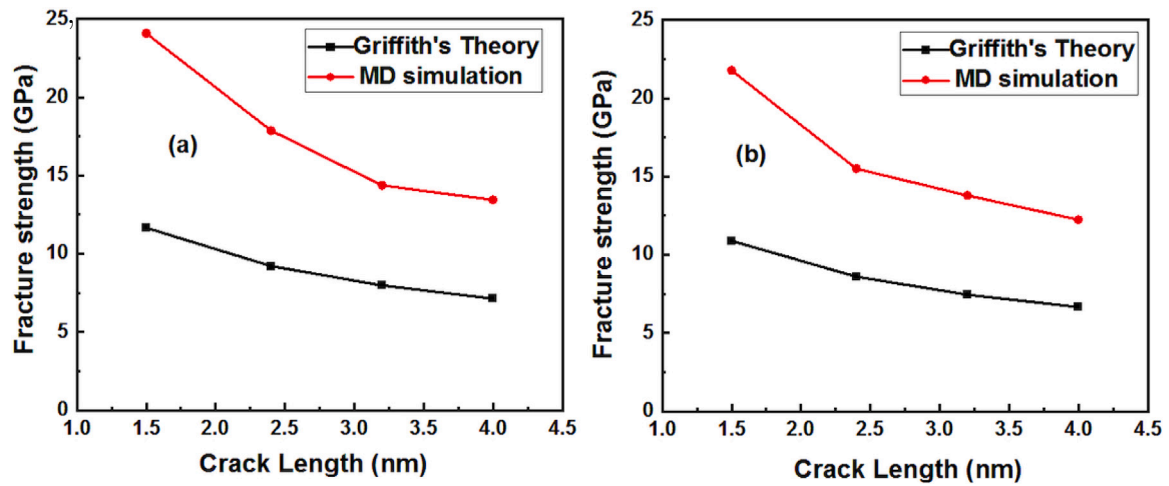


Fig. 10. Variations of fracture strength as a function of crack length estimated by MD simulations and Griffith theory under uniaxial tension along the (a) zigzag (b) armchair directions.

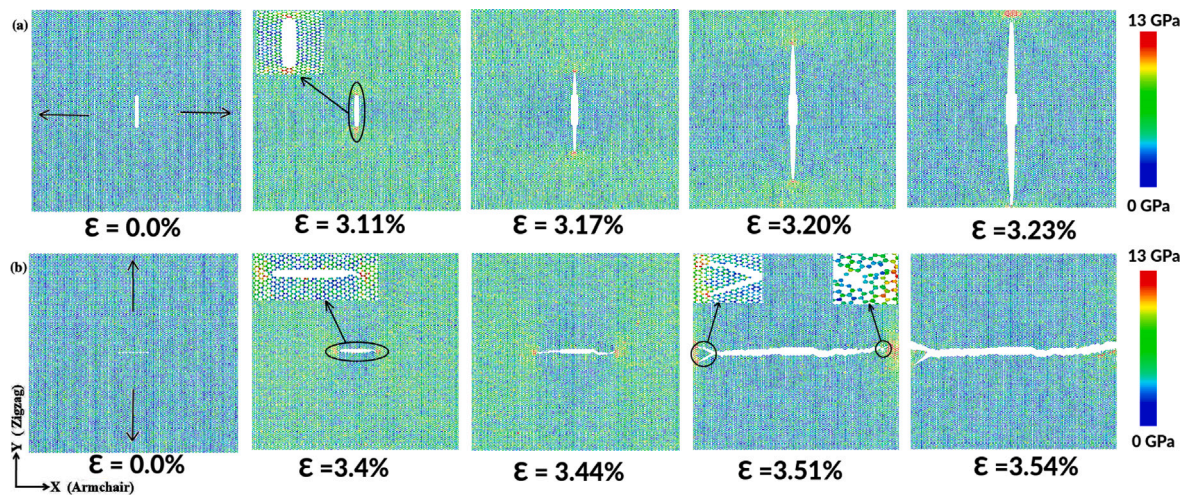


Fig. 11. Deformation process and stress distribution of 4 nm pre-cracked BO sheet at 300 K under uniaxial loading in (a) the armchair and (b) zigzag axis. The color bar displays the stress in GPa and the arrows indicate the loading direction.

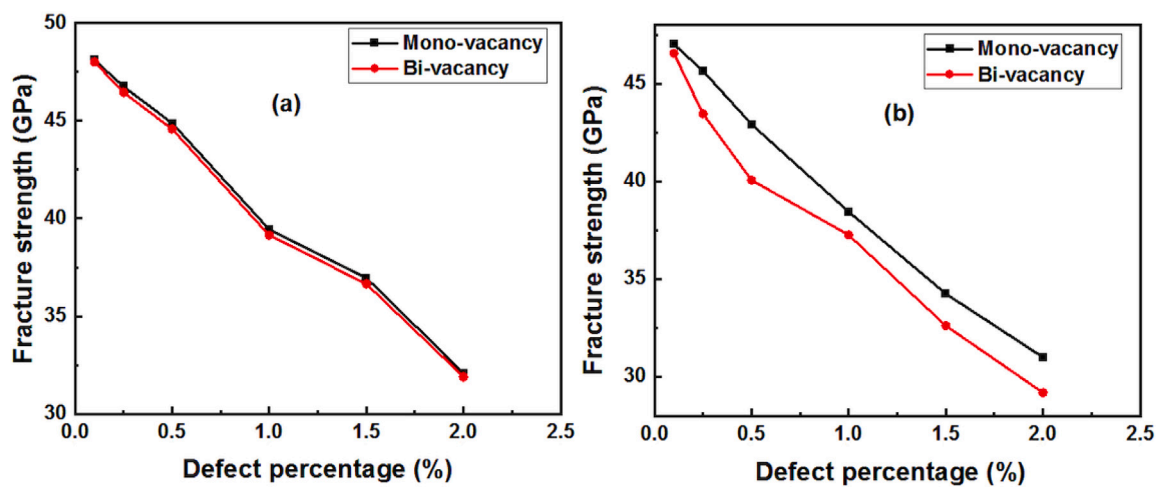


Fig. 12. Fracture strength versus mono-vacancy and bi-vacancy defects percentage for loading along (a) the zigzag direction and (b) the armchair direction.

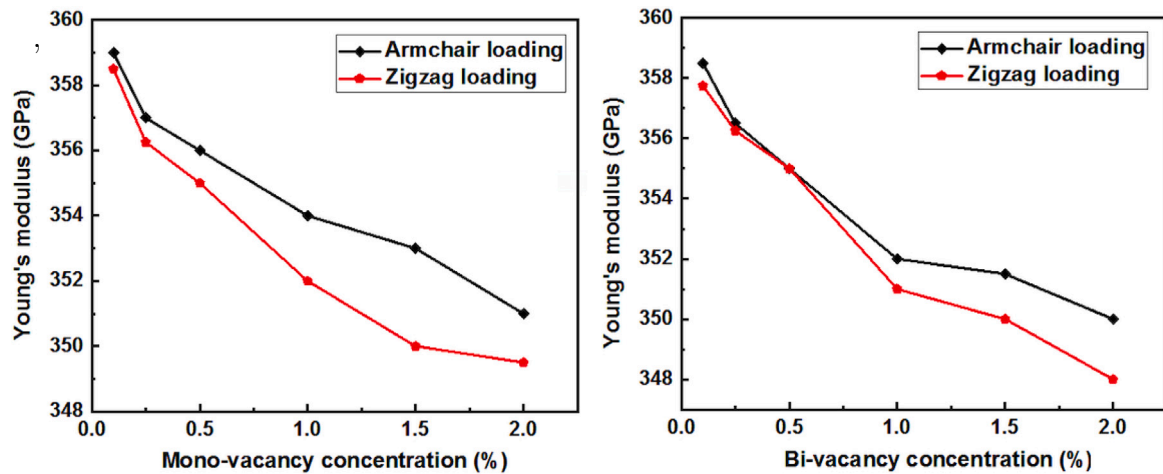


Fig. 13. Effects of defects concentration (mono-vacancy or bi-vacancy) on Young's modulus of monolayer BO under uniaxial tension along the armchair and zigzag orientations.

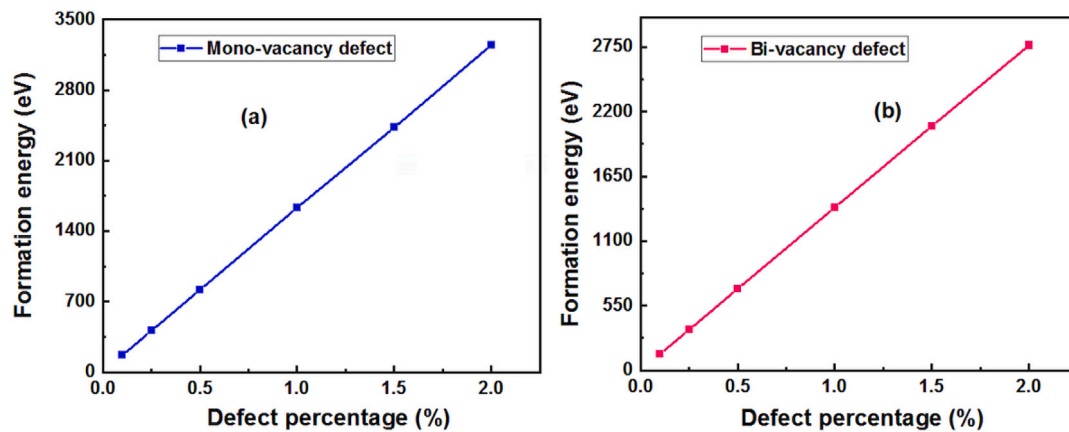


Fig. 14. Variation of formation energy as a function of (a) mono-vacancy and (b) bi-vacancy defect concentration in BO sheet.

strong symmetry breakdown. But the present study, reports an opposite effect for BO monolayer, that may be attributed to the interaction between dangling bonds or chemical instabilities, owing to the missing atoms for the discrete atomic structure of our compound.

Finally, the defect formation energy, defined as the energy necessary to break the bonds between an atom within the structure and its nearest neighbor atoms for a completely removing, of mono-vacancy and bi-vacancy, is given in Eq. (3) and displayed in Fig. 14. Our finding for a mono-vacancy (once O, and once B) and double vacancy is 1.27(O) eV, 2.1(B) eV and 4.1 eV, respectively. The difference of formation energy noticed for mono-vacancy among B and O atom is chiefly due to the difference in electronegativity between the two atoms. Depending on the higher value of formation energy corresponding to bi-vacancy, thus expected to be dominant defect type in the monolayer BO. We circulated the calculation up to 2% of defects, Fig. 14 displays the variation of formation energy in term of defect percentage in both vacancy type. It is apparent that the formation energy increases monotonically with defect ratio, which confirms its strong sensitivity to the vacancy's concentration. The present result predicts the structural changes and defect dominant of our material and reveals that the removal of a single atom requires much more energy than removal of a pair of BO, which indicates that bi-vacancy is the most typical defects in BO sheet in good agreement with [80,81].

4. Conclusion

In conclusion, the influence of temperature, crack length and point defects on the mechanical characteristics of the BO monolayer was

investigated in depth using MD simulations. The SW potential was employed to define the interatomic interaction in the BO structure. The fracture strain value profoundly demonstrates that the monolayer BO is more flexible to deform but harder to break with respect to its analogs. Furthermore, as the temperature rises, Young's modulus, fractures strength and strain decrease for both armchair and zigzag directions. At all temperatures, the zigzag direction is more resilient to fracture than the armchair direction. Moreover, while the change in crack length has almost no influence on the Young's modulus, it turns out to be very sensitive to the behavior of the fracture. The underestimation of the fracture strength, resulting from Griffith's prediction, shows the restriction of this model at the nanoscale. The fracture mechanism of the pre-cracked BO sheet reveals that branching phenomenon is prevailing in the armchair crack rather than in the zigzag one. The presence of vacancy defects arranged perpendicular to the loading direction, deals with a greater diminishment in fracture strength for bi-vacancies along the armchair direction compared to mono vacancies. However, almost the same decrease in fracture strength is observed along the zigzag axis regardless of the vacancies concentration. Thus, understanding the origin of the significant changes in the tensile properties of the BO monolayer subjected to vacancy, crack, etc, will help find a way to enhance its performance for potential use in future applications.

Declaration of competing interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

Acknowledgments

The authors would like to acknowledge the Académie Hassan II des Sciences et Techniques-Morocco for its financial support. The authors thank the LPHE-MS, Faculty of Sciences, Mohammed V University in Rabat, Morocco for the technical support through computer facilities, where all the calculations have been performed.

References

- [1] C. Lee, X. Wei, J.W. Kysar, J. Hone, Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene, *Science* 321 (5887) (2008) 385–388.
- [2] A.A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao, C.N. Lau, Superior thermal conductivity of single-layer graphene, *Nano Lett.* 8 (3) (2008) 902–907.
- [3] S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Aktürk, H. Sahin, S. Ciraci, Two-and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium, *Phys. Rev. Lett.* 102 (23) (2009) 236804.
- [4] R. Mas-Balleste, C. Gomez-Navarro, J. Gomez-Herrero, F. Zamora, 2D materials: to graphene and beyond, *Nanoscale* 3 (1) (2011) 20–30.
- [5] J. Kanga, I. Soukaina, L.B. Drissi, Electron-phonon investigation in stanene, *Comput. Mater. Sci.* 155 (2018) 63–68.
- [6] C. Kamal, M. Ezawa, Arsenene: Two-dimensional buckled and puckered honeycomb arsenic systems, *Phys. Rev. B* 91 (8) (2015) 085423.
- [7] I. Serifi, N.B.J. Kanga, L.B. Drissi, E.H. Saidi, Electron-phonon contribution in aluminene: superconductive and transport properties, *Superlattices Microstruct.* (2021) 106822.
- [8] L. Adamska, S. Sadasivam, I.V. J. J. Foley, P. Darancet, S. Sharifzadeh, First-principles investigation of borophene as a monolayer transparent conductor, *J. Phys. Chem. C* 122 (7) (2018) 4037–4045.
- [9] L.B. Drissi, S. Sadki, E.H. Saidi, Phosphorene: A 2D new derivative of black phosphorous, in: *Bookchapter of the Edited Book Monoelements: Properties and Applications*, Wiley-Scrivener, 2020, <http://dx.doi.org/10.1002/9781119655275.ch1>, Print-ISBN-13: 978-1119655251 Online ISBN: 9781119655275.
- [10] L. Zhao, S. Xu, M. wang, S. Lin, Probing the thermodynamic stability and phonon transport in two-dimensional hexagonal aluminum nitride monolayer, *J. Phys. Chem. C* 120 (48) (2016) 27675–27681.
- [11] H. Chakraborty, S. Mogurampelly, V.K. Yadav, U.V. Waghmare, M.L. Klein, Phonons and thermal conducting properties of borocarbonitride (BCN) nanosheets, *Nanoscale* 10 (47) (2018) 22148–22154.
- [12] L.B. Drissi, J. Kanga, S. Lounis, F. Djeflal, S. Haddad, Electron-phonon dynamics in 2D carbon based-hybrids XC (X=Si, Ge, Sn), *J. Phys. Condens. Matter* 31 (2019) 135702-135712.
- [13] M.H. Sadki, L.B. Kourra, K. Drissi, Tailoring acoustoelastic, piezoelectric and thermal properties of Janus GeC sheets, *Physica E* 128 (2021) 114625.
- [14] H. Zhong, K. Huang, G. Yu, S. Yuan, Electronic and mechanical properties of few-layer borophene, *Phys. Rev. B* 98 (5) (2018) 054104.
- [15] L. Li, J. Yang, On mechanical behaviors of few-layer black phosphorus, *Sci. Rep.* 8 (1) (2018) 3227.
- [16] F.J. Sonia, B. Ananthoju, M.K. Jangid, R. Kali, M. Aslam, A. Mukhopadhyay, Insight into the mechanical integrity of few-layers graphene upon lithiation/delithiation via in situ monitoring of stress development, *Carbon* 88 (2015) 206–214.
- [17] A. El-Bakkali, S. Sadki, L.B. Drissi, F. Djeflal, Layers engineering optoelectronic properties of 2D hexagonal GeS materials, *Physica E* 133 (2021) 114791.
- [18] X.Q. Zhang, C.H. Lin, Y.W. Tseng, K.H. Huang, Y.H. Lee, Synthesis of lateral heterostructures of semiconducting atomic layers, *Nano Lett.* 15 (1) (2015) 410–415.
- [19] M.P. Levendorf, C.J. Kim, L. Brown, P.Y. Huang, R.W. Havener, D.A. Muller, J. Park, Graphene and boron nitride lateral heterostructures for atomically thin circuitry, *Nature* 488 (7413) (2012) 627–632.
- [20] G. Fisichella, G. Greco, F. Roccaforte, F. Giannazzo, Current transport in graphene/AlGaIn/GaN vertical heterostructures probed at nanoscale, *Nanoscale* 6 (15) (2014) 8671–8680.
- [21] C. Zhang, S. Zhao, C. Jin, A.L. Koh, Y. Zhou, W. Xu, Q. Li, Q. Xiong, H. Peng, Z. Liu, Direct growth of large-area graphene and boron nitride heterostructures by a co-segregation method, *Nature Commun.* 6 (1) (2015) 1–8.
- [22] S. Sucharitakul, N.J. Goble, U.R. Kumar, R. Sankar, Z.A. Bogorad, F.C. Chou, Y.T. Chen, X.P.A. Gao, Intrinsic electron mobility exceeding $10^3 \text{ cm}^2/(\text{V s})$ in multilayer InSe FETs, *Nano Lett.* 15 (6) (2015) 3815–3819.
- [23] M.M. Samani, R. Gresback, M. Tian, K. Wang, A.A. Puretzky, C.M. Rouleau, G. Eres, I.N. Ivanov, K. Xiao, M.A. McGuire, G. Duscher, D.B. Geohegan, Pulsed laser deposition of photoresponsive two-dimensional GaSe nanosheet networks, *Adv. Funct. Mater.* 24 (40) (2014) 6365–6371.
- [24] W. Wan, Z. Song, S. Zhao, Y. Ge, Y. Liu, Modulation of heat transport in two-dimensional group-III chalcogenides, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 53 (18) (2020) 185102.
- [25] A. Harvey, C. Backes, Z. Gholamvand, D. Hanlon, D. McAteer, H.C. Nerl, E. McGuire, A. Seral-Ascaso, Q.M. Ramasse, N. McEvoy, S. Winters, N.C. Berner, D. McCloskey, J.F. Donegan, G.S. Duesberg, V. Nicolosi, J.N. Coleman, Preparation of gallium sulfide nanosheets by liquid exfoliation and their application as hydrogen evolution catalysts, *Chem. Mater.* 27 (9) (2015) 3483–3493.
- [26] P. Hu, L. Wang, M. Yoona, J. Zhang, W. Feng, X. Wang, Z. Wen, J.C. Idrobo, Y. Miyamoto, D.B. Geohegan, K. Xiao, Highly responsive ultrathin GaS nanosheet photodetectors on rigid and flexible substrates, *Nano Lett.* 13 (4) (2013) 1649–1654.
- [27] S. Lei, L. Ge, Z. Liu, S. Najmaei, G. Shi, G. You, J. Lou, R. Vajtai, P.M. Ajayan, Synthesis and photoresponse of large GaSe atomic layers, *Nano Lett.* 13 (6) (2013) 2777–2781.
- [28] Z. Wang, M. Safdar, M. Mirza, K. Xu, Q. Wang, Y. Huang, F. Wang, X. Zhan, J. He, High-performance flexible photodetectors based on GaTe nanosheets, *Nanoscale* 7 (16) (2015) 7252–7258.
- [29] J. Zhou, J. Shi, Q. Zeng, Y. Chen, L. Niu, F. Liu, T. Yu, K. Suenaga, X. Liu, J. Lin, Z. Liu, Inse monolayer: synthesis, structure and ultra-high second-harmonic generation, *2D Materials* 5 (2) (2018) 025019.
- [30] X. Chang, H. Li, G. Tang, Tensile mechanical properties and fracture behavior of monolayer InSe under axial tension, *Comput. Mater. Sci.* 158 (2019) 340–345.
- [31] V.T. Pham, T.H. Fang, Effects of temperature and intrinsic structural defects on mechanical properties and thermal conductivities of InSe monolayers, *Sci. Rep.* 10 (1) (2020) 1–15.
- [32] B. Chitara, A. Yakobovitz, Elastic properties and breaking strengths of GaS, GaSe and GaTe nanosheets, *Nanoscale* 10 (27) (2018) 13022–13027.
- [33] M. Yagmurcukardes, R.T. Senger, F.M. Peeters, H. Sahin, Mechanical properties of monolayer GaS and GaSe crystals, *Phys. Rev. B* 94 (24) (2016) 245407.
- [34] S. Demirci, N. Avazli, E. Durgun, S. Cahangirov, Structural and electronic properties of monolayer group III monochalcogenides, *Phys. Rev. B* 95 (11) (2017) 115409.
- [35] A. Chandran, K.C. George, Defect induced modifications in the optical, dielectric, and transport properties of hydrothermally prepared zns nanoparticles and nanorods, *J. Nanopart. Res.* 16 (3) (2014) 1–17.
- [36] X. Fan, Y. Li, L. Su, K. Ma, J. Li, H. Zhang, Theoretical prediction of tunable electronic and magnetic properties of monolayer antimonene by vacancy and strain, *Appl. Surf. Sci.* 488 (2019) 98–106.
- [37] R.A.S.I. Subad, T.S. Akash, P. Bose, Md M. Islam, Engineered defects to modulate fracture strength of single layer MoS₂: An atomistic study, *Physica B* (2020) 412219.
- [38] T. Zhang, X. Li, S. Kadkhodaei, H. Gao, Flaw insensitive fracture in nanocrystalline graphene, *Nano Lett.* 12 (9) (2012) 4605–4610.
- [39] M.A.N. Dewapriya, R.K.N.D. Rajapakse, A.S. Phani, Atomistic and continuum modelling of temperature-dependent fracture of graphene, *Int. J. Fract.* 187 (2) (2014) 199–212.
- [40] T. Rakib, S. Mojumder, S. Das, S. Saha, M. Motalab, Graphene and its elemental analogue: A molecular dynamics view of fracture phenomenon, *Physica B* 515 (2017) 67–74.
- [41] Y.P. Zhou, J.W. Jiang, Molecular dynamics simulations for mechanical properties of borophene: parameterization of valence force field model and Stillinger-Weber potential, *Sci. Rep.* 7 (1) (2017) 1–12.
- [42] S. Plimpton, Computational limits of classical molecular dynamics simulations, *Comput. Mater. Sci.* 4 (4) (1995) 361–364.
- [43] J.W. Jiang, Y.P. Zhou, Parameterization of stillinger-Weber potential for two-dimensional atomic crystals, in: *Handbook of Stillinger-Weber Potential Parameters for Two-Dimensional Atomic Crystals*, IntechOpen, 2017.
- [44] M. Ippolito, A. Mattoni, L. Colombo, F. Cleri, Fracture toughness of nanostructured silicon carbide, *Appl. Phys. Lett.* 87 (14) (2005) 141912.
- [45] F. Cleri, S.R. Phillpot, D. Wolf, S. Yip, Atomistic simulations of materials fracture and the link between atomic and continuum length scales, *J. Am. Ceram. Soc.* 81 (3) (1998) 501–516.
- [46] M.M. Islam, A. Ostadhossein, O. Borodin, A.T. Yeates, W.W. Tipton, R.G. Hennig, N. Kumar, A.C.T. van Duin, ReaxFF molecular dynamics simulations on lithiated sulfur cathode materials, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17 (5) (2015) 3383–3393.
- [47] K.E. Eshkalak, S. Sadeghzadeh, M. Jalaly, Thermal resistance analysis of hybrid graphene-boron nitride nanosheets: the effect of geometry, temperature, size, strain and structural defects, *Comput. Mater. Sci.* 174 (2020) 109484.
- [48] Md H. Rahman, S. Mitra, M. Motalab, P. Bose, Investigation on the mechanical properties and fracture phenomenon of silicon doped graphene by molecular dynamics simulation, *RSC Adv.* 10 (52) (2020) 31318–31332.
- [49] Z.D. Sha, Q.X. Pei, K. Zhou, Z. Dong, Y.W. Zhang, Temperature and strain-rate dependent mechanical properties of single-layer borophene, *Extreme Mech. Lett.* 19 (2018) 39–45.
- [50] Md F. Jamil, R.A.S.I. Subad, T.S. Akash, P. Bose, Intrinsic mechanical properties of monolayer nickel ditelluride: An atomistic study, *Comput. Condens. Matter* (2020) e00522.
- [51] S. Thomas, K.M. Ajith, S. Chandra, M.C. Valsakumar, Temperature dependent structural properties and bending rigidity of pristine and defective hexagonal boron nitride, *J. Phys.: Condens. Matter* 27 (2015) 315302.
- [52] K. Sadki, F.Z. Zanane, M. Ouahman, L.B. Drissi, Molecular dynamics study of pristine and defective hexagonal BN, SiC and SiGe monolayers, *Mater. Chem. Phys.* 242 (2020) 122474.

- [53] Ted L. Anderson, *Fracture Mechanics: Fundamentals and Applications*, CRC Press, 2017.
- [54] A.A. Griffith, The phenomena of rupture and flow in solids, *Philos. Trans. R. Soc. Lond. A* 221 (1921) 163.
- [55] M.Q. Le, Y. Umeno, Fracture of monolayer boronitrene and its interface with graphene, *Int. J. Fract.* 205 (2) (2017) 151–168.
- [56] T.S. Akash, R.A.S.I. Subad, P. Bose, Md M. Islam, Nanomechanics of antimonene allotropes under tensile loading, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 23 (10) (2021) 6241–6251.
- [57] Md F. Jamil, R.A.S.I. Subad, T.S. Akash, P. Bose, Intrinsic mechanical properties of monolayer nickel ditelluride: An atomistic study, *Comput. Condens. Matter* 26 (2021) e00522.
- [58] E.H. Chowdhury, Md H. Rahman, P. Bose, R. Jayan, Md M. Islam, Atomic-scale analysis of the physical strength and phonon transport mechanisms of monolayer β -bismuthene, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 22 (48) (2020) 28238–28255.
- [59] M. Saaoud, K. Sadki, L.B. Drissi, F. Djeflal, Mechanical response of η -layered borophene: impact of strain, temperature, vacancies and intercalation, *Euro. Phys. J. Appl. Phys.* (2020) 30401.
- [60] S.M.H. Lee, H.P. Mohammadi, A. Rajabpour, Tuning shear mechanical properties and tensile strength anisotropy of monolayer black phosphorene: A molecular dynamics study, *Mater. Today Commun.* 26 (2021) 101796.
- [61] Q.X. Pei, Z.D. Sha, Y.Y. Zhang, Y.W. Zhang, Effects of temperature and strain rate on the mechanical properties of silicene, *J. Appl. Phys.* 115 (2) (2014) 023519.
- [62] F. Liu, P. Ming, J. Li, Ab initio calculation of ideal strength and phonon instability of graphene under tension, *Phys. Rev. B* 76 (6) (2007) 064120.
- [63] Z.D. Sha, Q.X. Pei, Y.Y. Zhang, Y.W. Zhang, Atomic vacancies significantly degrade the mechanical properties of phosphorene, *Nanotechnology* 27 (31) (2016) 315704.
- [64] J.W. Jiang, T. Rabczuk, H.S. Park, A stillingereber potential for single-layered black phosphorus, and the importance of cross-pucker interactions for a negative poisson ratio and edge stress-induced bending, *Nanoscale* 7 (14) (2015) 6059–6068.
- [65] M.Z. Hossain, T. Hao, B. Silverman, Stillingereber potential for elastic and fracture properties in graphene and carbon nanotubes, *J. Phys.: Condens. Matter* 30 (5) (2018) 055901.
- [66] Le. Minh-Quy, Atomistic study on the tensile properties of hexagonal AlN, BN, GaN, InN and SiC sheets, *J. Comput. Theor. Nanosci.* 11 (6) (2014) 1458–1464.
- [67] Huijuan Zhao, N.R. Aluru, Temperature and strain-rate dependent fracture strength of graphene, *J. Appl. Phys.* 108 (6) (2010) 064321.
- [68] Zhao Huijuan, K. Min, Narayana R. Aluru, Size and chirality dependent elastic properties of graphene nanoribbons under uniaxial tension, *Nano Lett.* 9 (8) (2009) 3012–3015.
- [69] Md Faiyaz Jamil, et al., Atomistic elucidation of mechanical properties and fracture phenomenon of defective indium selenide monolayer, *Comput. Condens. Matter* (2022) e00637.
- [70] J.W. Jiang, Y.P. Zhou, Parameterization of stillinger-Weber potential for two-dimensional atomic crystals, in: *Handbook of Stillinger-Weber Potential Parameters for Two-Dimensional Atomic Crystals*, IntechOpen, 2017.
- [71] G. Pluvinae, L. Milovic, *Fracture at All Scales*, Springer International Publishing, 2017.
- [72] T.L. Anderson, *Fracture Mechanics: Fundamentals and Applications*, third ed., Taylor & Francis, CRC Press, Boca Raton, FL, 2005.
- [73] M.A.N. Dewapriya, R.K.N.D. Rajapakse, A.S. Phani, Atomistic and continuum modelling of temperature-dependent fracture of graphene, *Int. J. Fract.* 187 (2) (2014) 199–212.
- [74] H. Yin, H.J. Qi, F. Fan, T. Zhu, B. Wang, Y. Wei, Griffith criterion for brittle fracture in graphene, *Nano Lett.* 15 (3) (2015) 1918–1924.
- [75] P. Zhang, L. Ma, F. Fan, Z. Zeng, C. Peng, P.E. Loya, Z. Liu, Y. Gong, J. Zhang, X. Zhang, P.M. Ajayan, T. Zhu, J. Lou, Fracture toughness of graphene, *Nature Commun.* 5 (1) (2014) 1–7.
- [76] M.Q. Le, R.C. Batra, Mode-I stress intensity factor in single layer graphene sheets, *Comput. Mater. Sci.* 118 (2016) 251–258.
- [77] T. Rakib, S. Saha, M. Motalab, S. Mojumder, M.M. Islam, Atomistic representation of anomalies in the failure behaviour of nanocrystalline silicene, *Sci. Rep.* 7 (1) (2017) 1–12.
- [78] A.S.M.J. Islam, Md.S. Islam, N. Ferdous, J. Park, A.G. Bhuiyan, A. Hashimoto, Anisotropic mechanical behavior of two dimensional silicon carbide: Effect of temperature and vacancy defects, *Mater. Res. Express* 6 (12) (2019) 125073.
- [79] N. Jing, Q. Xue, C. Ling, M. Shan, T. Zhang, X. Zhou, Z. Jiao, Effect of defects on Young's modulus of graphene sheets: a molecular dynamics simulation, *Rsc Adv.* 2 (24) (2012) 9124–9129.
- [80] T. Sun, G. Zhang, D. Xu, X. Lian, H. Li, W. Chen, C. Su, Defect chemistry in 2D materials for electrocatalysis, *Mater. Today Energy* 12 (2019) 215–238.
- [81] D. Yan, Y. Li, J. Huo, R. Chen, L. Dai, S. Wang, Defect chemistry of nonprecious-metal electrocatalysts for oxygen reactions, *Adv. Mater.* 29 (48) (2017) 1606459.

Contribution IV

Moduler la résistance à la rupture d'un nanofeuille InTe par des pores/fissures auxiliaires : une étude par la dynamique moléculaire (Soumis)

Résumé

La famille $M^{III}X^{VI}$, en particulier InTe, est devenue un sujet d'intérêt de nos jours en raison de son application potentielle dans de nombreux nanodispositifs optoélectroniques. Cependant, malgré la volumineuse littérature d'études traitant de ce sujet, la compréhension fondamentale de l'évolution de la fracture en présence de défauts reste inexplorée. Ainsi, l'objectif de cette étude était de réaliser des simulations MD pour étudier les propriétés mécaniques d'une fissure préexistante, d'une monocouche nano-poreuse d'InTe, et l'effet des interactions des fissures et des pores incorporés dans plusieurs modèles. L'existence d'un défaut sous forme de pore et de fissure réduit considérablement la contrainte de rupture de la feuille d'InTe. Nous avons ensuite découvert que la résistance à la rupture de l'InTe peut être optimisée en constituant quatre pores ou fissures auxiliaires placés symétriquement autour de la fissure principale à des coordonnées spécifiques. Nous appelons ce mécanisme "le mécanisme de protection contre les défaillances". L'analyse entre ces deux méthodes révèle un avantage en faveur des pores qui se traduit par une amélioration de la résistance à la rupture de 15 % contre 8 % en faveur des fissures auxiliaires. De plus, nous avons mis en lumière les mécanismes de rupture en tenant compte de la propagation de la fissure tout au long de l'investigation. L'étude fournit une orientation avantageuse pour la conception et l'application pratique des nanofeuilles InTe.

4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les propriétés élastiques et structurales des matériaux bidimensionnels à structures hexagonales dans les trois sections suivantes :

— La réponse élastique des matériaux 2D, dans laquelle nous avons montré que le module de Young des matériaux hybrides 2D diminue lorsque la masse atomique moyenne des constituants du réseau hexagonal augmente, ce qui est clairement observé entre SiC/ SiGe et BO/InTe. Aussi, l'hybridation, l'empilement et l'intercalation, permettent de modifier les propriétés de ces matériaux élastiques et de les utiliser dans des applications appropriées. De plus, nous avons montré que l'effet de la température et de la vitesse de déformation sur les propriétés de traction étant significatif de sorte que la première les diminuait tandis que la seconde les augmentait légèrement.

— L'influence des défauts sur le comportement élastique, dans lequel nous avons détaillé certains résultats liés à différents types de défauts tels que les lacunes, les pores et les fissures. Nous avons trouvé que le type de lacune, son emplacement, sa concentration et son orientation avec la direction de la charge ont une forte influence sur les propriétés de traction. Il est également montré que l'augmentation du diamètre des pores et de la longueur des fissures réduit considérablement les propriétés mécaniques des matériaux bidimensionnels, ce qui permet d'être exploité sous différentes formes et dans de nombreuses applications.

— La modulation de la contrainte de traction ultime par des configurations de pores/fissures auxiliaires dans laquelle nous avons démontré que des formations spéciales contenant des pores ou des fissures auxiliaires à des endroits spécifiques autour de la fissure principale peuvent améliorer la contrainte de traction ultime. Enfin, une comparaison précise des deux stratégies a montré un avantage pour les pores par rapport aux fissures auxiliaires

Conclusion générale et perspectives

De nos jours, les matériaux bidimensionnels sont devenus omniprésents et indispensables dans notre vie quotidienne, en raison de leurs caractéristiques inhabituelles et pour une potentielle utilisation dans des applications telles que le photovoltaïque, les semi-conducteurs et la purification de l'eau. Pour les optimiser et les fabriquer, il est nécessaire de comprendre leur structure et leur comportement. Intéressés par ce domaine de recherche pertinent, nous avons consacré ce mémoire de thèse à l'étude des propriétés thermomécaniques et structurales de nanomatériaux bidimensionnels avec et sans défauts, à base de groupes III et IV par, la méthode de la dynamique moléculaire.

Dans ce mémoire de thèse, nous avons consacré tout un chapitre à nos travaux de recherche et nos récents résultats obtenus dans le domaine. Plus précisément, ce volet présente nos études par la dynamique moléculaire des matériaux hybrides bidimensionnels (2D), notamment le SiC, le SiGe, le borophène, le BO et l'InTe, vu leur intérêt et leur importance dans le domaine de la matière condensée et de la nanotechnologie. Cette conclusion générale présente un bilan condensé des idées clés développées dans ce travail de recherche.

Récemment, les chercheurs de la matière condensée se sont intéressés aux matériaux hybrides à base de silicium en raison de leurs propriétés physiques fascinantes. Dans ce cadre, nous avons contribué avec une étude des propriétés thermomécaniques et structurales des silicène-graphène (2D-SiC) et silicène-germanène (2D-SiGe). Nous avons utilisé la simulation par la dynamique moléculaire et le potentiel Tersoff, qui sont considérés comme des outils cruciaux dans l'approche des phénomènes mécaniques et thermiques. Par rapport à la monocouche de SiGe pure et défectueuse, nos résultats montrent que la feuille de SiC a des valeurs de module de Young et de rupture plus élevées, qui diminuent toutes les deux avec la température, tandis que la vitesse de déformation les améliore. L'analyse du processus de fracture révèle un comportement de rupture fragile pour les hybrides purs et défectueux. La concentration de défauts influence également les résultats et révèle une diminution de 13,48-31,15 GPa et de 6,1-9,64 GPa de la résistance à la rupture des feuilles de SiC et de SiGe, respectivement, pour un rapport de 0,5 à 2%.

Encouragés par l'importance des nanomatériaux multicouches dans les applications nanotechnologiques, nous avons construit un modèle de borophène multicouche avec l'empilement AA. Dans ce contexte, nous avons analysé les paramètres élastiques de l'état pur et de l'état défectueux ainsi que l'effet de l'empilement sur ceux-ci en utilisant

la simulation par la dynamique moléculaire, qui ont révélé a un effet important sur les modules élastiques. Lorsque l'on augmente η (le nombre de couches), le module de Young diminue, tandis que le coefficient de Poisson reste quasiment inchangé avec $\nu_x \simeq -0.03$ et $\nu_y \simeq -0.07$. Nous avons étudié l'intercalation des atomes d'azote (N) et les défauts structuraux du borophène multicouche qui ont révélé que le coefficient de Poisson du borophène multicouche intercalé par N conserve son signe négatif, en plus du fait que les valeurs des résistances à la rupture dépendent du type, de la concentration et de l'emplacement du défaut.

Dans cette présente étude, un intérêt particulier a été apporté à l'effet des défauts topologiques tels que : les fissures et les nanopores des monocouches de monochalcogénures du groupe III, sur leurs propriétés thermomécaniques. Dans ce contexte, à l'aide des simulations par la dynamique moléculaire, nous avons étudié l'effet de la température, de la longueur des fissures et des défauts ponctuels sur les propriétés de traction de la monocouche BO. Cette étude a révélé que le BO est plus souple à se déformer mais plus difficile à se briser que d'autres matériaux hexagonaux bidimensionnels. Il est également démontré que les propriétés de traction sont très sensibles à la température dans les directions armchair et zigzag. De plus, des fissures de différentes longueurs ont un impact considérable sur le comportement à la rupture de la nanofeuille BO, alors que l'allongement des fissures n'a aucune influence sur le module de Young. Les défauts de mono et bi-lacune, disposés perpendiculairement à la direction du chargement, influencent grandement la réduction de la résistance à la rupture.

Les défauts multiatomiques tels que les fissures et les pores peuvent souvent être délibérément imprimés sur les nanostructures pour obtenir les propriétés souhaitées. Nous en déduisons que le type de défaut, sa localisation, sa concentration et son orientation par rapport à la direction de la charge ont une forte influence sur les propriétés en traction de nos matériaux hexagonaux 2D. Nous avons étudié deux stratégies pour améliorer la résistance à la fracture des nanofeuilles InTe. La comparaison de la contribution de chaque stratégie à l'amélioration de la contrainte ultime de traction a révélé la supériorité de la méthode fissure/pore par rapport à la méthode fissure/fissure auxiliaire.

De tout ce qui prélude, il est clair que grâce aux développements rapides qu'ont connus les nanotechnologies, les matériaux proposés et les propriétés étudiées dans ce travail restent des sujets de recherche majeurs. Plusieurs obstacles sont encore à franchir, diverses clés demeurent perdues et de nombreuses questions sans réponses émergent dont les études pourront faire l'objet de développements ultérieurs. Ceci nous a motivé à lancer de futures perspectives. Il serait intéressant d'examiner les propriétés thermomécaniques des matériaux bidimensionnels en présence des défauts, et principalement ceux relatifs au dessalement et à la purification.

Bibliographie

- [1] D. Feng, G. Jin. Introduction To Condensed Matter Physics, Volume 1. World Scientific Publishing Company, 2005.
- [2] M. O. Steinhauser,. "Introduction to molecular dynamics simulations : Applications in hard and soft condensed matter physics." Molecular dynamics-Studies of synthetic and biological macromolecules (2012) : 3-28.
- [3] A. R. Leach. Molecular modelling : principles and applications. Pearson education, 2001.
- [4] J. M. Haile. Molecular dynamics simulation : elementary methods. John Wiley & Sons, Inc., 1992.
- [5] D. C. Rapaport. "The Art of Molecular Dynamics Simulation." Computers in Physics 10.5 (1996) : 456-456.
- [6] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov. "Electric field effect in atomically thin carbon films." science 306.5696 (2004) : 666-669.
- [7] C. Gómez-Navarro, M. Burghard, K. Kern. "Elastic properties of chemically derived single graphene sheets." Nano letters 8.7 (2008) : 2045-2049.
- [8] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, J. Hone. "Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene." science 321.5887 (2008) : 385-388.
- [9] S. Park, R. S. Ruoff. "Chemical methods for the production of graphenes." Nature nanotechnology 4.4 (2009) : 217-224.
- [10] Z. Song, Z. Xu. "Geometrical effect ‘stiffens’ graphene membrane at finite vacancy concentrations." Extreme Mechanics Letters 6 (2016) : 82-87.
- [11] D. A. Dikin, S. Stankovich, E. J. Zimney, R. D. Piner, G.H.B. Dommett, G. Evmenenko, S. T. Nguyen, R. S. Ruoff. "Preparation and characterization of graphene oxide paper." Nature 448.7152 (2007) : 457-460.

- [12] M. A. Rafiee, J. Rafiee, Z. Wang, H. Song, Z. Z. Yu, N. Koratkar. "Enhanced mechanical properties of nanocomposites at low graphene content." *ACS nano* 3.12 (2009) : 3884-3890.
- [13] B. Lalmi, H. Oughaddou, H. Enriquez, A. Kara, S. Vizzini, B. Ealet, B. Aufray. "Epitaxial growth of a silicene sheet." *Applied Physics Letters* 97.22 (2010) : 223109.
- [14] M. E. Dávila, L. Xian, S. Cahangirov, A. Rubio, G. Le Lay. "Germanene : a novel two-dimensional germanium allotrope akin to graphene and silicene." *New Journal of Physics* 16.9 (2014) : 095002.
- [15] H. Şahin, S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Bekaroglu, E. Aktürk, R. T. Senger, S. Ciraci, "Monolayer honeycomb structures of group-IV elements and III-V binary compounds : First-principles calculations." *Physical Review B* 80.15 (2009) : 155453
- [16] S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Aktürk, H. Şahin, S. Ciraci. "Two-and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium." *Physical review letters* 102.23 (2009) : 236804.
- [17] Q. X. Pei, Z. D. Sha, Y. Y. Zhang, Y. W. Zhang,. "Effects of temperature and strain rate on the mechanical properties of silicene." *Journal of Applied Physics* 115.2 (2014) : 023519.
- [18] N. Ding, H. Wang, L. Liu, W. Guo, X. Chen, C.M.L. Wu,. "Effects of mechanical strain on the performance of germanene sheets : Strength, failure behavior, and electronic structure." *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 113 (2018) : 201-209.
- [19] L. Sun, B. Wang, Y. Wang. "A novel silicon carbide nanosheet for high-performance humidity sensor." *Advanced Materials Interfaces* 5.6 (2018) : 1701300.
- [20] M. Kim, N. Jung, K. Eom, S. J. Yoo, J. Y. Kim, J. H. Jang, H. J. Kim, B. K. Hong, E. Cho. "Effects of anode flooding on the performance degradation of polymer electrolyte membrane fuel cells." *Journal of Power Sources* 266 (2014) : 332-340.
- [21] W. Y. Tsai, P. C. Gao, B. Daffos, P. L. Taberna, C. R. Pérez, Y. Gogotsi, F. Favier, P. Simon,. "Ordered mesoporous silicon carbide-derived carbon for high-power supercapacitors." *Electrochemistry Communications* 34 (2013) : 109-112.

- [22] H. Sakib, T. Ahmed, S. Subrina. "Uniaxial strain on monolayer SiGe : Strain tunable electronic properties." 2018 10th International Conference on Electrical and Computer Engineering (ICECE). IEEE, 2018.
- [23] S. Chabi, K. Kadel. "Two-dimensional silicon carbide : emerging direct band gap semiconductor." *Nanomaterials* 10.11 (2020) : 2226.
- [24] S. S. Lin,. "Light-emitting two-dimensional ultrathin silicon carbide." *The Journal of Physical Chemistry C* 116.6 (2012) : 3951-3955.
- [25] S. Lin, S. Zhang, X. Li, W. Xu, X. Pi, X. Liu, F. Wang, H. Wu, H. Chen. "Quasi-two-dimensional SiC and SiC₂ : interaction of silicon and carbon at atomic thin lattice plane." *The Journal of Physical Chemistry C* 119.34 (2015) : 19772-19779.
- [26] J. Shi, Y. Gao, X. L. Wang, S. N. Yun. "Electronic, elastic and piezoelectric properties of two-dimensional group-IV buckled monolayers." *Chinese Physics Letters* 34.8 (2017) : 087701.
- [27] R. C. Andrew, R. E. Mapasha, A. M. Ukpong, N. Chetty. "Erratum : Mechanical properties of graphene and boronitrene [Phys. Rev. B 85, 125428 (2012)]." *Physical Review B* 100.20 (2019) : 209901.
- [28] L. B. Drissi, K. Sadki. "Elastic properties and sound velocities of silicane/graphane hybrids." *Mechanics of Materials* 89 (2015) : 151-158.
- [29] P. Jamdagni, A. Kumar, A. Thakur, R. Pandey, P. K. Ahluwalia. "Stability and electronic properties of SiGe-based 2D layered structures." *Materials Research Express* 2.1 (2015) : 016301.
- [30] M. Q. Le. "Atomistic study on the tensile properties of hexagonal AlN, BN, GaN, InN and SiC sheets." *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience* 11.6 (2014) : 1458-1464.
- [31] M. Q. Le, D. T. Nguyen. "Atomistic simulations of pristine and defective hexagonal BN and SiC sheets under uniaxial tension." *Materials Science and Engineering : A* 615 (2014) : 481-488.
- [32] K. Sadki, F. Z. Zanane, L. B. Drissi. "Molecular dynamics study of pristine and defective hexagonal BN, SiC and SiGe monolayers." *Materials Chemistry and Physics* 242 (2020) : 122474.

- [33] A.J. Mannix, X.F. Zhou, B. Kiraly, J.D. Wood, D. Alducin, B.D. Myers, X. Liu, B.L. Fisher, U. Santiago, J.R. Guest, M.J. Yacaman, A. Ponce, A.R. Oganov, M.C. Hersam, N.P. Guisinger. "Synthesis of borophenes : Anisotropic, two-dimensional boron polymorphs." *Science* 350.6267 (2015) : 1513-1516
- [34] M. Saaoud, K. Sadki, L. B. Drissi, F. Djeflal. "Mechanical response of η -layered borophene : impact of strain, temperature, vacancies and intercalation." *The European Physical Journal Applied Physics* 90.3 (2020) : 30401.
- [35] H. Zhong, K. Huang, G. Yu, S. Yuan. "Electronic and mechanical properties of few-layer borophene." *Physical Review B* 98.5 (2018) : 054104.
- [36] C. Chen, H. Lv, P. Zhang, Z. Zhuo, Y. Wang, C. Ma, W. Li, X. Wang, B. Feng, P. Cheng, X. Wu, K. Wu, L. Chen,. "Synthesis of bilayer borophene." *Nature Chemistry* 14.1 (2022) : 25-31.
- [37] H. Li, L. Jing, W. Liu, J. Lin, R. Y. Tay, S. H. Tsang, E.H.T. Teo,. "Scalable production of few-layer boron sheets by liquid-phase exfoliation and their superior supercapacitive performance." *Acs Nano* 12.2 (2018) : 1262-1272.
- [38] Z. D. Sha, Q. X. Pei, K. Zhou, Z. Dong, Y. W. Zhang. "Temperature and strain-rate dependent mechanical properties of single-layer borophene." *Extreme Mechanics Letters* 19 (2018) : 39-45.
- [39] S. Sucharitakul, N.J. Goble, U.R. Kumar, R. Sankar, Z.A. Bogorad, F.C. Chou, Y.T. Chen, X.P.A. Gao, "Intrinsic electron mobility exceeding $10^3 \text{ cm}^2/(\text{V s})$ in multilayer InSe FETs." *Nano letters* 15.6 (2015) : 3815-3819.
- [40] M.M. Samani, R. Gresback, M. Tian, K. Wang, A.A. Puretzky, C.M. Rouleau, G. Eres, I.N. Ivanov, K. Xiao, M.A. McGuire, G. Duscher, D.B. Geohegan., "Pulsed laser deposition of photoresponsive two-dimensional GaSe nanosheet networks." *Advanced Functional Materials* 24.40 (2014) : 6365-6371.
- [41] W. Wan, Z. Song, S. Zhao, Y. Ge, Y. Liu., "Modulation of heat transport in two-dimensional group-III chalcogenides." *Journal of Physics D : Applied Physics* 53.18 (2020) : 185102.
- [42] A. Harvey, C. Backes, Z. Gholamvand, D. Hanlon, D. McAteer, H.C. Nerl, E. McGuire, A. Seral-Ascaso, Q.M. Ramasse, N. McEvoy, S. Winters, N.C. Berner, D. McCloskey, J.F. Donegan, G.S. Duesberg, V. Nicolosi, J.N. Coleman., "Preparation of gallium sulfide nanosheets by liquid exfoliation and their application as hydrogen evolution catalysts". *Chemistry of Materials* 27.9 (2015) : 3483-3493

- [43] P. Hu, L.Wang, M. Yoon, J. Zhang. W. Feng, X.Wang, Z.Wen, J.C. Idrobo, Y. Miyamoto, D.B. Geohegan, K. Xiao., "Highly responsive ultrathin GaS nanosheet photodetectors on rigid and flexible substrates". *Nano letters* 13.4 (2013) : 1649-1654
- [44] S. Lei, L. Ge, Z. Liu, S. Najmaei, G. Shi, G. You, J. Lou, R. Vajtai, P.M. Ajayan., "Synthesis and photoresponse of large GaSe atomic layers". *Nano letters* 13.6 (2013) : 2777-2781
- [45] Z. Wang, M. Safdar, M. Mirza, K. Xu, Q. Wang, Y. Huang, F. Wang, X. Zhan, J. He., "High-performance flexible photodetectors based on GaTe nanosheets". *Nanoscale* 7.16 (2015) : 7252-7258.
- [46] J. Zhou, J. Shi, Q. Zeng, Y. Chen, L. Niu, F. Liu, T. Yu, K. Suenaga, X. Liu, J. Lin, Z. Liu., "InSe monolayer : synthesis, structure and ultra-high second-harmonic generation". *2D Materials* 5.2 (2018) : 025019.
- [47] X. Chang, H. Li, G. Tang., "Tensile mechanical properties and fracture behavior of monolayer InSe under axial tension." *Computational Materials Science* 158 (2019) : 340-345.
- [48] V. T. Pham, T. H. Fang. "Effects of temperature and intrinsic structural defects on mechanical properties and thermal conductivities of InSe monolayers." *Scientific reports* 10.1 (2020) : 1-15.
- [49] M. Saaoud, K. Sadki, L. B. Drissi, M. Abdel-Hafiz., "Thermo-mechanical response of pristine and defective 2D hexagonal boron oxide" *Materials Science & Engineering B*. (2022)
- [50] M. Hasanian, B. Mortazavi, A. Ostadhossein, T. Rabczuk, A.C.T. Van Duin., "Hydrogenation and defect formation control the strength and ductility of MoS2 nanosheets : Reactive molecular dynamics simulation." *Extreme Mechanics Letters* 22 (2018) : 157-164.
- [51] Z. Hu, Z. Wu, C. Han, J. He, Z. Ni, W. Chen., "Two-dimensional transition metal dichalcogenides : interface and defect engineering." *Chemical Society Reviews* 47.9 (2018) : 3100-3128.
- [52] Z. Yu, Y. Pan, Y. Shen, Z. Wang, Z.Y. Ong, T. Xu, R. Xin, L. Pan, B. Wang, L. Sun, J. Wang, G. Zhang, Y. W. Zhang, Y. Shi, X. Wang., "Towards intrinsic charge transport in monolayer molybdenum disulfide by defect and interface engineering." *Nature communications* 5.1 (2014) : 1-7.

- [53] X. Zhang, Q. Liao, S. Liu, Z. Kang, Z. Zhang, J. Du, F. Li, S. Zhang, J. Xiao, B. Liu, Y. Ou, X. Liu, L. Gu, Y. Zhang,. "Poly (4-styrenesulfonate)-induced sulfur vacancy self-healing strategy for monolayer MoS₂ homojunction photodiode." *Nature Communications* 8.1 (2017) : 1-8.
- [54] S.S.K. Mallineni, S. Bhattacharya, F. Liu, P. Puneet, A. Rao, A. Srivastava, R. Podila,. "Defect Engineered 2D Materials for Energy Applications." *TWO-DIMENSIONAL MATERIALS* (2016) : 83.
- [55] H. Qin, V. Sorkin, Q. X. Pei, Y. Liu, Y. W. Zhang,. "Failure in two-dimensional materials : Defect sensitivity and failure criteria." *Journal of Applied Mechanics* 87.3 (2020) : 030802.
- [56] T. S. Akash, R. A.S.I. Subad, P. Bose, Md. M. Islam,. "Nanomechanics of anti-monene allotropes under tensile loading." *Physical Chemistry Chemical Physics* 23.10 (2021) : 6241-6251.
- [57] A. Moncmanová. "Environmental factors that influence the deterioration of materials." *Environmental Deterioration of Materials* 21 (2007) : 1.
- [58] E. Billig. "Some defects in crystals grown from the melt-I. Defects caused by thermal stresses." *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 235.1200 (1956) : 37-55.
- [59] Md. F. Jamil, Md. S.A.M, Jony, T. S. Akash, R.A.S.I. Subad, Md. M. Islam,. "Atomistic elucidation of mechanical properties and fracture phenomenon of defective indium selenide monolayer." *Computational Condensed Matter* 30 (2022) : e00637.
- [60] R.A.S.I. Subad, T.S. Akash, P. Bose, Md.M. Islam., "Engineered defects to modulate fracture strength of single layer MoS₂ : An atomistic study." *Physica B : Condensed Matter* (2020) : 412219.
- [61] V. Obadeanu,P. Chelu, V. Marinca, *Dynamique du solide elastique homogene et isotrope (geometrisation)*, Univ. din Timisoara. Fac. de stiinte ale naturii. Seminarul de geometrie si topologie, (1983).
- [62] J. F. Lamond, J. H. Pielert, *Significance of tests and properties of concrete and concrete-making materials*, Vol. 169. ASTM international, 2006.
- [63] M. J. Madou, *Fundamentals of microfabrication : the science of miniaturization*, CRC press, (2002).

- [64] J. B. Wachtman, W. R. Cannon, M. J. Matthewson, Mechanical properties of ceramics, John Wiley & Sons, (2009).
- [65] H. V. Keer, Principles of the solid state, New Age International, (1993).
- [66] J. L. Rose, P. B. Nagy. "Ultrasonic Waves in Solid Media." Acoustical Society of America Journal 107.4 (2000) : 1807-1808.
- [67] Y. Sun, S. E. Thompson, T. Nishida, Strain effect in semiconductors : theory and device applications, Springer Science & Business Media, (2009).
- [68] M. Levy, H. Bass, R. Stern, Handbook of Elastic Properties of Solids, Liquids, and Gases, Four-Volume Set, Academic Press, (2000).
- [69] S.M. Nahid, S. Nahian, M. Motalab, T. Rakib, S. Mojumder, Md.M. Islam., "Tuning the mechanical properties of silicene nanosheet by auxiliary cracks : a molecular dynamics study." RSC advances 8.53 (2018) : 30354-30365.
- [70] M.A.N. Dewapriya, S.A. Meguid. "Atomistic simulations of nanoscale crack-vacancy interaction in graphene." Carbon 125 (2017) : 113-131.
- [71] C. E. Inglis, "Stress in a Plate Due to the Presence of Cracks and Sharp Corners," Transactions of the Institute of Naval Architects, 55, pp. 219 -241, 1913.
- [72] A. A. Griffith, "Theory of Rupture," proceedings of the First International Congress in Applied Mechanics, 1924.
- [73] E. Orowan, "Energy Criterion of Fracture," Welding Journal Research Supplement, pp. 157-160, March 1955.
- [74] E. Orowan, D. K. Felbeck, "Experiments of Brittle Fracture of Steel Plates," Welding Journal Research Supplement, p p. 570-575, November 1955.
- [75] G. R. Irwin, J. A. Kies,. "Fracturing and fracture dynamics." Welding Journal 31.2 (1952) : 95-100.
- [76] G. R. Irwin, "Analysis of Stresses and Strains Near the End of a Crack Traversing a Plate," Journal of Applied Mechanics, Transaction ASME, 79 : pp. 361-364, 1957.
- [77] G. R. Irwin, J. A. Kies, "Critical Energy Rate Analysis of Fracture Strength," welding Journal Research Supplement, Volume 33, pp. 193s-198s, 1954.
- [78] ASM Handbook Committee. Metals Handbook Comprehensive Index. Asm International, 1987.

- [79] W. Tada, P. C. Paris, G. R. Irwin, "The Stress Analysis of Crack Handbook," Del Research Corporation, Hellertown, Pa., 2976.
- [80] D. S. Dugdale, "Yielding of Steel Sheets Containing Slits," Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 8, pp. 100-108, 1960.
- [81] G. I. Barenblatt, "The Mathematical Theory of Equilibrium of Crack in Brittle Fracture," Advances in Applied Mechanics, VII, pp. 55- 129, 1962.
- [82] G. P. Cherepanov, The propagation of cracks in a continuous medium, Journal of Applied Mathematics and Mechanics, 31(3), 1967, p. 503-512.
- [83] J. R. Rice, "A path independent integral and the approximate analysis of strain concentration by notches and cracks." (1968) : 379-386.
- [84] J. R. Rice, "Some remarks on elastic crack-tip stress fields." International Journal of Solids and Structures 8.6 (1972) : 751-758.
- [85] D. Frenkel, B. Smit, "Understanding Molecular Simulation from Algorithms to Applications", Vol. 2. San Diego : Academic press, 1996.
- [86] M.P. Allen, D.J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Oxford University Press (1987)
- [87] M. Parrinello, R. Aneesur., "Crystal structure and pair potentials : A molecular-dynamics study." Physical review letters 45.14 (1980) : 1196.
- [88] A. Chandra., "Effects of ion atmosphere on hydrogen-bond dynamics in aqueous electrolyte solutions." Physical Review Letters 85.4 (2000) : 768.
- [89] R. N. Salaway, L. V. Zhigilei,. "Molecular dynamics simulations of thermal conductivity of carbon nanotubes : Resolving the effects of computational parameters." International Journal of Heat and Mass Transfer 70 (2014) : 954-964.
- [90] G. Kresse, J. Hafner,. "Ab initio molecular dynamics for liquid metals. vol. 48, issue 17." Phys Rev B Condens Matter (1993) : 13115-13118.
- [91] R. P. Joshi,D. K. Ferry,. "Effect of multi-ion screening on the electronic transport in doped semiconductors : A molecular-dynamics analysis." Physical Review B 43.12 (1991) : 9734.
- [92] H.J.C. Berendsen, J.P.M. Postma, W.F. van Gunsteren, A. Dinola, J.R. Haak, J. Chem. Phys. 81, 3684 (1984).
- [93] H.C. Andersen, J. Chem. Phys. 72, 2384 (1980).

- [94] W.G. Hoover, Phys. Rev. A 31, 1695 (1985).
- [95] S. Nosé and M. Klein, Mol. Phys. 50, 1055 (1983).
- [96] S. Toxvaerd, Phys. Rev. E 47, 343 (1993).
- [97] B. Widom, J. Chem. Phys. 39, 2802 (1963).
- [98] M. Winning, G. Gottstein, L.S. Shvindlerman., "On the mechanisms of grain boundary migration." Acta Materialia 50.2 (2002) : 353-363.
- [99] N. Inui, S. Iwasaki. "Interaction energy between graphene and a silicon substrate using pairwise summation of the Lennard-Jones potential." e-Journal of Surface Science and Nanotechnology 15 (2017) : 40-49.
- [100] S.I. Satake, N. Inoue, T. Kunugi, M. Shibahara, H. Kasahara., "Large-scale molecular dynamics simulation for two Ar clusters impact on 4H-SiC." Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms 257.1-2 (2007) : 639-644.
- [101] P. Atkins, J. de Paula., "Physical Chemistry for the Life Sciences". New York, N.Y. W. H. Freeman Company, 2006. (469-472).
- [102] D. J. Royer, "Bonding Theory". New York, NY. :McGraw-Hill, Inc., 1968.
- [103] R. Chang, "Physical chemistry for the biosciences". University Science Books, No. 572 C4P4. 2005.
- [104] Y. P. Zhou, J. W. Jiang., "Molecular dynamics simulations for mechanical properties of borophene : parameterization of valence force field model and Stillinger-Weber potential." Scientific reports 7.1 (2017) : 1-12.
- [105] W. H. Moon, H. J. Hwang., "A modified Stillinger–Weber empirical potential for boron nitride." Applied surface science 239.3-4 (2005) : 376-380.
- [106] P. Erhart, K. Albe., "Analytical potential for Atomistic simulations of silicon, carbon, and silicon carbide." Physical Review B 71.3 (2005) : 035211.
- [107] G. Rajasekaran, R. Kumar, A. Parashar., "Tersoff potential with improved accuracy for simulating graphene in molecular dynamics environment." Materials Research Express 3.3 (2016) : 035011.
- [108] H. Yan, X. Hu, H. Jónsson., "Atomic structure of β -SiC (100) surfaces : a study using the Tersoff potential." Surface science 316.1-2 (1994) : 181-188.

- [109] J. W. Jiang, Y. P. Zhou., "Parameterization of Stillinger-Weber Potential for Two-Dimensional Atomic Crystals." Handbook of Stillinger-Weber Potential Parameters for Two-Dimensional Atomic Crystals. IntechOpen, 2017.
- [110] Z. Zhang, Y. Chen, H. Zheng., "A modified Stillinger-Weber potential-based hyperelastic constitutive model for nonlinear elasticity." International Journal of Solids and Structures 51.7-8 (2014) : 1542-1554.
- [111] J. W. Jiang., "Parametrization of Stillinger-Weber potential based on valence force field model : application to single-layer MoS2 and black phosphorus." Nanotechnology 26.31 (2015) : 315706.
- [112] T. H. Tran, S. Winczewski., "Central-force decomposition of the Tersoff potential." TASK Quarterly 21 (2017) : 261-283.
- [113] J. Tersoff. "New empirical model for the structural properties of silicon." Physical review letters 56.6 (1986) : 632.
- [114] J. Tersoff. "Modeling solid-state chemistry : Interatomic potentials for multicomponent systems." Physical review B 39.8 (1989) : 5566.
- [115] P. Erhart, K. Albe., "Analytical potential for atomistic simulations of silicon, carbon, and silicon carbide." Physical Review B 71.3 (2005) : 035211.
- [116] L. Lindsay, D. A. Broido. "Optimized Tersoff and Brenner empirical potential parameters for lattice dynamics and phonon thermal transport in carbon nanotubes and graphene." Physical Review B 81.20 (2010) : 205441.
- [117] P. M. Agrawal, L. M. Raff, R. Komanduri. "Monte Carlo simulations of void-nucleated melting of silicon via modification in the Tersoff potential parameters." Physical Review B 72.12 (2005) : 125206.
- [118] R. Smith. "A semi-empirical many-body interatomic potential for modelling dynamical processes in gallium arsenide." Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms 67.1-4 (1992) : 335-339.
- [119] M. Sayed, J. H. Jefferson, A. B. Waker, A. G. Cullis., "Molecular dynamics simulations of implantation damage and recovery in semiconductors." Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms 102.1-4 (1995) : 218-222.

- [120] K. Nordlund, J. Nord, J. Frantz, J. Keinonen,. "Strain-induced Kirkendall mixing at semiconductor interfaces." *Computational materials science* 18.3-4 (2000) : 283-294.
- [121] W. H. Moon, H. J. Hwang,. "Structural and thermodynamic properties of GaN : a molecular dynamics simulation." *Physics Letters A* 315.3-4 (2003) : 319-324.
- [122] S. Goumri-Said, M. B. Kanoun, A. E. Merad, G. Merad, H. Aouragc,. "Prediction of structural and thermodynamic properties of zinc-blende AlN : molecular dynamics simulation." *Chemical Physics* 302.1-3 (2004) : 135-141.
- [123] D. Powell, M. A. Migliorato, A. G. Cullis,. "Optimized Tersoff potential parameters for tetrahedrally bonded III-V semiconductors." *Physical Review B* 75.11 (2007) : 115202.
- [124] J. C. Butcher. *Numerical methods for ordinary differential equations*. John Wiley & Sons, 2016.
- [125] A. Cromer. "Stable solutions using the Euler approximation." *American Journal of Physics* 49.5 (1981) : 455-459.
- [126] D. V. Griffith, L. M. Smith. "Numerical Methods for Engineers : A Programming Approach." (1991).
- [127] L. Verlet, "Computer" experiments" on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules." *Physical review* 159.1 (1967) : 98.
- [128] L. Verlet, "Computer" experiments" on classical fluids. ii. equilibrium correlation functions." *Physical Review* 165.1 (1968) : 201.
- [129] W. C. Swope, William, H. C. Andersen, P. H. Berens, K. R. Wilson. "A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules : Application to small water clusters." *The Journal of chemical physics* 76.1 (1982) : 637-649.
- [130] G. J. Slotman, A. Fasolino. "Structure, stability and defects of single layer hexagonal BN in comparison to graphene." *Journal of Physics : Condensed Matter* 25.4 (2012) : 045009.
- [131] S. Thomas, K. M. Ajith, S. Chandra, M. C. Valsakumar. "Temperature dependent structural properties and bending rigidity of pristine and defective hexagonal boron nitride." *Journal of Physics : Condensed Matter* 27.31 (2015) : 315302.

- [132] X. Cai, Y. Luo, B. Liu, H.M. Cheng,. "Preparation of 2D material dispersions and their applications." *Chemical Society Reviews* 47.16 (2018) : 6224-6266.
- [133] R. Zhang, R. Cheung. "Mechanical properties and applications of two-dimensional materials." *Two-dimensional Materials-Synthesis, Characterization and Potential Applications*. Rijeka, Croatia : InTech (2016) : 219-246.
- [134] X. Zhang, L. Hou, A. Ciesielski, P. Samori,. "2D materials beyond graphene for high-performance energy storage applications." *Advanced Energy Materials* 6.23 (2016) : 1600671.
- [135] P. Delhaes, ed. "Graphite and precursors". Vol. 1. CRC Press, 2000.
- [136] H. O. Pierson. "Handbook of carbon, graphite, diamonds and fullerenes : processing, properties and applications". William Andrew, 2012.
- [137] D. D. L. Chung. "Review graphite." *Journal of materials science* 37.8 (2002) : 1475-1489.
- [138] A. K. Mallik. "Introductory Chapter : Engineering Applications of Diamond." *Engineering Applications of Diamond* (2021) : 3.
- [139] C. Frondel, U. B. Marvin. "Lonsdaleite, a hexagonal polymorph of diamond." *Nature* 214.5088 (1967) : 587-589.
- [140] S. Bhargava, H. B. Bist, S. Sahli, M. Aslam, H. B. Tripathi. "Diamond polytypes in the chemical vapor deposited diamond films." *Applied physics letters* 67.12 (1995) : 1706-1708.
- [141] M. N-Gamo, I. Sakaguchi, K. P. Loh, H. Kanda, T. Ando. "Confocal Raman spectroscopic observation of hexagonal diamond formation from dissolved carbon in nickel under chemical vapor deposition conditions." *Applied physics letters* 73.6 (1998) : 765-767.
- [142] A. Misra, P. K. Tyagi, B. S. Yadav, P. Rai, D. S. Misra, V. Pancholi, I. D. Samajdar. "Hexagonal diamond synthesis on h-Ga N strained films." *Applied physics letters* 89.7 (2006) : 071911.
- [143] D. G. McCulloch, S. Wong, T. B. Shiell, B. Haberl, B. A. Cook, X. Huang, R. Boehler, D. R. McKenzie, J. E. Bradby. "Investigation of Room Temperature Formation of the Ultra-Hard Nanocarbons Diamond and Lonsdaleite." *Small* 16.50 (2020) : 2004695.

- [144] L. Qingkun, S. Yi, L. Zhiyuan, Z. Yu. "Lonsdaleite—a material stronger and stiffer than diamond." *Scripta Materialia* 65.3 (2011) : 229-232.
- [145] O. E. Kvyatkovskii, M. Shelyapina, B. F. Shchegolev, L. S. Vorotilova, I. B. Zakharova. "Cluster ab initio calculations for the C₆₀F₂₄, C₆₀Cl₂₄, and C₆₀Br₂₄ halofullerenes." *Physics of the Solid State* 44.3 (2002) : 585-587.
- [146] R. S. Ruoff. A. L. Ruoff. "The bulk modulus of C₆₀ molecules and crystals : a molecular mechanics approach." *Applied physics letters* 59.13 (1991) : 1553-1555.
- [147] G. Lalwani, B. Sitharaman. "Multifunctional fullerene-and metallofullerene-based nanobiomaterials." *Nano Life* 3.03 (2013) : 1342003.
- [148] C. H. Kiang, W. A. Goddard III, R. Beyers, D S. Bethune. "Carbon nanotubes with single-layer walls." *Carbon* 33.7 (1995) : 903-914.
- [149] M. Endo, M. S. Strano, P. M. Ajayan. "Potential applications of carbon nanotubes." *Carbon nanotubes* (2007) : 13-62.
- [150] M. Endo, S. Koyama, Y. Matsuda, T. Hayashi, Y. A. Kim. "Thrombogenicity and Blood Coagulation of a Microcatheter Prepared from Carbon Nanotube-Nylon-Based Composite." *Nano letters* 5.1 (2005) : 101-105.
- [151] S. Koyama, H. Haniu, K. Osaka, H. Koyama, N. Kuroiwa, M. Endo, Y. A. Kim, T. Hayashi. "Medical Application of Carbon-Nanotube-Filled Nanocomposites : The Microcatheter." *Small* 2.12 (2006) : 1406-1411.
- [152] P. M. Ajayan, O. Z. Zhou. "Applications of carbon nanotubes." *Carbon nanotubes* (2001) : 391-425.
- [153] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim. "The electronic properties of graphene." *Reviews of modern physics* 81.1 (2009) : 109.
- [154] K. Cao, S. Feng, Y. Han, L. Gao, T. H. Ly, Z. Xu, Y. Lu.. "Elastic straining of free-standing monolayer graphene." *Nature communications* 11.1 (2020) : 1-7.
- [155] P. Zhang, L. Ma, F. Fan, Z. Zeng, C. Peng, P. E. Loya, Z. Liu, Y. Gong, J. Zhang, X. Zhang, P. M. Ajayan, T. Zhu, J. Lou. "Fracture toughness of graphene." *Nature communications* 5.1 (2014) : 1-7.
- [156] N. Fan, Z. Ren, G. Jing, J. Guo, B. Peng, H. Jiang . "Numerical investigation of the fracture mechanism of defective graphene sheets." *Materials* 10.2 (2017) : 164.

- [157] F. Liu, P. Ming, J. Li. "Ab initio calculation of ideal strength and phonon instability of graphene under tension." *Physical Review B* 76.6 (2007) : 064120.
- [158] H. Oughaddou, H. Enriquez, M. R. Tchalala, H. Yildirim, A. J. Mayne, A. Boudounan, G. Dujardin, M. Ait Ali, A. Kara . "Silicene, a promising new 2D material." *Progress in Surface Science* 90.1 (2015) : 46-83.
- [159] H. T. Nguyen, M. Q. Le, V. T. Nguyen. "Mode-I stress intensity factors of silicene, AlN, and SiC hexagonal sheets." *Materials Research Express* 5.6 (2018) : 065025.
- [160] D. T. Nguyen, M. Q. Le. "Mechanical properties of various two-dimensional silicon carbide sheets : An atomistic study." *Superlattices and Microstructures* 98 (2016) : 102-115.
- [161] H. Langueur, K. Kassali, N. Lebga. "Density Functional Study of Structural, Mechanic, Thermodynamic and Dynamic Properties of SiGe Alloys." *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience* 10.1 (2013) : 86-94.
- [162] G. G. Guzmán-Verri, L.C.L.Y. Voon. "Electronic structure of silicon-based nanostructures." *Physical Review B* 76.7 (2007) : 075131.
- [163] Z. Ni, Q. Li, K. Tang, J. Zheng, J. Zhou, R. Qin, Z. Gao, D. Yu, J. Lu. "Tunable bandgap in silicene and germanene." *Nano letters* 12.1 (2012) : 113-118.
- [164] N. D. Drummond, V. Zolyomi, V. I. Fal'ko. "Electrically tunable band gap in silicene." *Physical Review B* 85.7 (2012) : 075423.
- [165] W. F. Tsai, C. Y. Huang, T. R. Chang, H. Lin, H. T. Jeng, A. Bansil. "Gated silicene as a tunable source of nearly 100% spin-polarized electrons." *Nature communications* 4.1 (2013) : 1-6.
- [166] S. Chowdhury, D. Jana. "A theoretical review on electronic, magnetic and optical properties of silicene." *Reports on Progress in Physics* 79.12 (2016) : 126501.
- [167] J. Zhao, H. Liu, Z. Yu, R. Quhe, S. Zhou, Y. Wang C. C. Liu, H. Zhong, N. Han, J. Lu, Y. Yao, K. Wu. "Rise of silicene : A competitive 2D material." *Progress in Materials Science* 83 (2016) : 24-151.
- [168] A. Nijamudheen, R. Bhattacharjee, S. Choudhury, A. Datta. "Electronic and chemical properties of germanene : the crucial role of buckling." *The Journal of Physical Chemistry C* 119.7 (2015) : 3802-3809.
- [169] A. Molle, J. Goldberger, M. Houssa, Y. Xu, S. C. Zhang, D. Akinwande. "Buckled two-dimensional Xene sheets." *Nature materials* 16.2 (2017) : 163-169.

- [170] A. Acun, L. Zhang, P. Bampoulis, M. Farmanbar, A. V. Houselt, A. N. Rudenko, M. Lingenfelder, G. Brocks, B. Poelsema, M. I. Katsnelson, H.J.W. Zandvliet. "Germanene : the germanium analogue of graphene." *Journal of physics : Condensed matter* 27.44 (2015) : 443002.
- [171] S. Balendhran, S. Walia, H. Nili, S. Sriram, M. Bhaskaran. "Elemental analogues of graphene : silicene, germanene, stanene, and phosphorene." *small* 11.6 (2015) : 640-652.
- [172] B. Mortazavi, A. Dianat, G. Cuniberti, T. Rabczuk. "Application of silicene, germanene and stanene for Na or Li ion storage : A theoretical investigation." *Electrochimica Acta* 213 (2016) : 865-870.
- [173] B. Mortazavi, O. Rahaman, M. Makaremi, A. Dianat, G. Cuniberti, T. Rabczuk. "First-principles investigation of mechanical properties of silicene, germanene and stanene." *Physica E : Low-dimensional Systems and Nanostructures* 87 (2017) : 228-232.
- [174] R. John, B. Merlin. "Theoretical investigation of structural, electronic, and mechanical properties of two dimensional C, Si, Ge, Sn." *Crystal Structure Theory and Applications* 5.3 (2016) : 43-55.
- [175] Z. Shi, Z. Zhang, A. Kutana, B. I. Yakobson. "Predicting two-dimensional silicon carbide monolayers." *ACS nano* 9.10 (2015) : 9802-9809.
- [176] D. M. Hoat, M. Naseri, N. N. Hieu, R. Ponce-Pérez, J. F. Rivas-Silva, G. H. Cocletzi. "Transition from indirect to direct band gap in SiC monolayer by chemical functionalization : A first principles study." *Superlattices and Microstructures* 137 (2020) : 106320.
- [177] T. P. Kaloni, M. Modarresi, M. Tahir, M. R. Roknabadi, G. Schreckenbach, M. S. Freund. "Electrically engineered band gap in two-dimensional Ge, Sn, and Pb : a first-principles and tight-binding approach." *The Journal of Physical Chemistry C* 119.21 (2015) : 11896-11902.
- [178] T. P. Kaloni, U. Schwingenschlögl. "Stability of germanene under tensile strain." *Chemical Physics Letters* 583 (2013) : 137-140.
- [179] M. S. Manju, K. M. Ajith, M. C. Valsakumar. "Strain induced anisotropic mechanical and electronic properties of 2D-SiC." *Mechanics of Materials* 120 (2018) : 43-52.

- [180] K. Sadki, M. Saaoud, L. B. Drissi. "Thermal strain engineering of mechanical properties in Si-based hybrid sheets via molecular dynamics simulations." *Journal of Molecular Modeling* 27.10 (2021) : 1-11.
- [181] X. K. Lu, T. Y. Xin, Q. Zhang, Q. Xu, T. H. Wei, Y. X. Wang. "Versatile mechanical properties of novel g-SiC x monolayers from graphene to silicene : a first-principles study." *Nanotechnology* 29.31 (2018) : 315701.
- [182] A.S.M.J. Islam, Md. S. Islam, N. Ferdous, J. Park, A. G. Bhuiyan, A. Hashimoto. "Anisotropic mechanical behavior of two dimensional silicon carbide : effect of temperature and vacancy defects." *Materials Research Express* 6.12 (2019) : 125073.
- [183] J. Guan, D. Liu, Z. Zhu, D. Tomanek. "Two-dimensional phosphorus carbide : Competition between sp^2 and sp^3 bonding." *Nano letters* 16.5 (2016) : 3247-3252.
- [184] A.S.M.J. Islam, Md.S. Akbar, Md.S. Islam, J. Park. "Temperature-and defect-induced uniaxial tensile mechanical behaviors and the fracture mechanism of two-dimensional silicon germanide." *ACS omega* 6.34 (2021) : 21861-21871.
- [185] S. Thomas, S. U. Lee. "Atomistic insights into the anisotropic mechanical properties and role of ripples on the thermal expansion of h-BCN monolayers." *RSC advances* 9.3 (2019) : 1238-1246.
- [186] B. Mortazavi, M. E. Madjet, M. Shahrokhi, S. Ahzi, X. Zhuang, T. Rabczuk. "Nanoporous graphene : A 2D semiconductor with anisotropic mechanical, optical and thermal conduction properties." *Carbon* 147 (2019) : 377-384.
- [187] S. Chabi, Z. Guler, A. J. Brearley, A. D. Benavidez, T. S. Luk. "The Creation of True Two-Dimensional Silicon Carbide." *Nanomaterials* 11.7 (2021) : 1799.
- [188] J. P. Singh, M. Kumar, A. Sharma, G. Pandey, K. H. Chae, S. Lee. "Bottom-up and top-down approaches for MgO." *Sonochemical Reactions*. IntechOpen, 2020.
- [189] M. Naguib, M. Kurtoglu, V. Presser, J. Lu, J. Niu, M. Heon, L. Hultman, Y. Gogotsi, M. W. Barsoum. "Two-dimensional nanocrystals produced by exfoliation of Ti_3AlC_2 ." *Advanced materials* 23.37 (2011) : 4248-4253.
- [190] J. Kang, J. D. Wood, S. A. Wells, J. H. Lee, X. Liu, K. S. Chen, M. C. Hersam. "Solvent exfoliation of electronic-grade, two-dimensional black phosphorus." *ACS nano* 9.4 (2015) : 3596-3604.

- [191] M. Chhowalla, H. S. Shin, G. Eda, L. J. Li, K. P. Loh, H. Zhang "The chemistry of two-dimensional layered transition metal dichalcogenide nanosheets." *Nature chemistry* 5.4 (2013) : 263-275.
- [192] J. Zheng, H. Zhang, S. Dong, Y. Liu, C. T. Nai, H. S. Shin, H. Y. Jeong, B. Liu, K. P. Loh. "High yield exfoliation of two-dimensional chalcogenides using sodium naphthalenide." *Nature communications* 5.1 (2014) : 1-7.
- [193] S. Chabi, H. Chang, Y. Xia, Y. Zhu. "From graphene to silicon carbide : ultrathin silicon carbide flakes." *Nanotechnology* 27.7 (2016) : 075602.
- [194] J. Chen, N. Li, Y. Wei, B. Han, Y. Zhang. "A low-cost approach to fabricate SiC nanosheets by reactive sintering from Si powders and graphite." *Journal of Alloys and Compounds* 788 (2019) : 345-351.
- [195] C. Wang, N. Huang, H. Zhuang, Z. Zhai, B. Yang, L. Liu, X. jiang. "Growth of large-scale heteroepitaxial 3C-SiC films and nanosheets on silicon substrates by microwave plasma enhanced CVD at higher powers." *Surface and Coatings Technology* 299 (2016) : 96-103.
- [196] S. Chabi, V. G. Rocha, E. G-Tuñón, C. Ferraro, E. Saiz, Y. Xia, Y. Zhu. "Ultralight, strong, three-dimensional SiC structures." *Acs Nano* 10.2 (2016) : 1871-1876.
- [197] S. Chabi, Z. Guler, A. J. Brearley, A. D. Benavidez, T. S. Luk. "The Creation of True Two-Dimensional Silicon Carbide." *Nanomaterials* 11.7 (2021) : 1799.
- [198] T. Ogitsu, F. Gygi, J. Reed, Y. Motome, E. Schwegler, G. Galli. "Imperfect crystal and unusual semiconductor : Boron, a frustrated element." *Journal of the American Chemical Society* 131.5 (2009) : 1903-1909.
- [199] X. Sun, X. Liu, J. Yin, j. Yu, Y. Li, Y. Hang, X. Zhou, M. Yu, J. Li, G. Tai, W. Guo. "Two-Dimensional Boron Crystals : Structural Stability, Tunable Properties, Fabrications and Applications." *Advanced Functional Materials* 27.19 (2017) : 1603300.
- [200] E. S. Penev, S. Bhowmick, A. Sadrzadeh, B. I. Yakobson. "Polymorphism of two-dimensional boron." *Nano letters* 12.5 (2012) : 2441-2445.
- [201] X. F. Zhou, X. Dong, A. R. Oganov, Q. Zhu, Y. Tian, H. T. Wang. "Semimetallic two-dimensional boron allotrope with massless Dirac fermions." *Physical Review Letters* 112.8 (2014) : 085502.

- [202] S. Er, G. A. de Wijs, G. Brocks. "DFT study of planar boron sheets : a new template for hydrogen storage." *The Journal of Physical Chemistry C* 113.43 (2009) : 18962-18967.
- [203] A. Lebon, R. H. Aguilera-del-Toro, L. J. Gallego, A. Vega. "Li-decorated Pmmn8 phase of borophene for hydrogen storage. A van der Waals corrected density-functional theory study." *International Journal of Hydrogen Energy* 44.2 (2019) : 1021-1033.
- [204] H. R. Jiang, Z. Lu, M. C. Wu, F. Ciucci, T. S. Zhao. "Borophene : a promising anode material offering high specific capacity and high rate capability for lithium-ion batteries." *Nano Energy* 23 (2016) : 97-104.
- [205] J. Liu, C. Zhang, L. Xu, S. Ju. "Borophene as a promising anode material for sodium-ion batteries with high capacity and high rate capability using DFT." *RSC advances* 8.32 (2018) : 17773-17785.
- [206] W. Li, L. Kong, C. Chen, J. Gou, S. Sheng, W. Zhang, H. Li, L. Chen, P. Cheng, K. Wu, . "Experimental realization of honeycomb borophene." *Science Bulletin* 63.5 (2018) : 282-286.
- [207] B. Feng, J. Zhang, Q. Zhong, W. Li, S. Li, H. Li, P. Cheng, S. Meng, L. Chen, K. Wu. "Experimental realization of two-dimensional boron sheets." *Nature chemistry* 8.6 (2016) : 563-568.
- [208] W. L. Li, X. Chen, T. Jian, T. T. Chen, J. Li, L. S. Wang. "From planar boron clusters to borophenes and metalloborophenes." *Nature Reviews Chemistry* 1.10 (2017) : 1-9.
- [209] A. P. Sergeeva, I. A. Popov, Z. A. Piazza, W. L. Li, C. Romanescu, L. S. Wang, A. I. Boldyrev. "Understanding boron through size-selected clusters : structure, chemical bonding, and fluxionality." *Accounts of chemical research* 47.4 (2014) : 1349-1358.
- [210] L. S. Wang. "Photoelectron spectroscopy of size-selected boron clusters : from planar structures to borophenes and borospherenes." *International Reviews in Physical Chemistry* 35.1 (2016) : 69-142.
- [211] W. H. Eberhardt, B. Crawford Jr, W. N. Lipscomb. "The valence structure of the boron hydrides." *The Journal of Chemical Physics* 22.6 (1954) : 989-1001.
- [212] W. N. Lipscomb. "The boranes and their relatives." *Science* 196.4294 (1977) : 1047-1055.

- [213] J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani, J. Akimitsu. "Superconductivity at 39 K in magnesium diboride." *nature* 410.6824 (2001) : 63-64.
- [214] B. Feng, O. Sugino, R. Y. Liu, J. Zhang, R. Yukawa, M. Kawamura, T. Iimori, H. Kim, Y. Hasegawa, H. Li, L. Chen, K. Wu, H. Kumigashira, F. Komori, T. C. Chiang, S. Meng, I. Matsuda. "Dirac fermions in borophene." *Physical review letters* 118.9 (2017) : 096401.
- [215] H. Wang, Q. Li, Y. Gao, F. Miao, X. F. Zhou, X. G. Wan. "Strain effects on borophene : ideal strength, negative Poisson's ratio and phonon instability." *New Journal of Physics* 18.7 (2016) : 073016.
- [216] Z. Pang, X. Qian, Y. Wei, R. Yang. "Super-stretchable borophene." *EPL (Europhysics Letters)* 116.3 (2016) : 36001.
- [217] A. Lherbier, A. R. Botello-Méndez, J. C. Charlier. "Electronic and optical properties of pristine and oxidized borophene." *2D Materials* 3.4 (2016) : 045006.
- [218] B. Peng, H. Zhang, H. Shao, Y. Xu, R. Zhang, H. Zhu. "The electronic, optical, and thermodynamic properties of borophene from first-principles calculations." *Journal of Materials Chemistry C* 4.16 (2016) : 3592-3598.
- [219] V. Wang, W. T. Geng. "Lattice defects and the mechanical anisotropy of borophene." *The Journal of Physical Chemistry C* 121.18 (2017) : 10224-10232.
- [220] Z. Zhang, Y. Yang, E. S. Penev, B. I. Yakobson. "Elasticity, flexibility, and ideal strength of borophenes." *Advanced Functional Materials* 27.9 (2017) : 1605059.
- [221] G. I. Giannopoulos. "Mechanical behavior of planar borophenes : a molecular mechanics study." *Computational Materials Science* 129 (2017) : 304-310.
- [222] B. Mortazavi, O. Rahaman, A. Dianat, T. Rabczuk. "Mechanical responses of borophene sheets : a first-principles study." *Physical Chemistry Chemical Physics* 18.39 (2016) : 27405-27413.
- [223] Q. Peng, L. Han, X. Wen, S. Liu, Z. Chen, J. Lian, S. De. "Mechanical properties and stabilities of α -boron monolayers." *Physical Chemistry Chemical Physics* 17.3 (2015) : 2160-2168.
- [224] M. Q. Le, B. Mortazavi, T. Rabczuk. "Mechanical properties of borophene films : a reactive molecular dynamics investigation." *Nanotechnology* 27.44 (2016) : 445709.

- [225] L. Shao, Y. Li, Q. Yuan, M. Li, Y. Du, F. Zeng, P. Ding, H. Ye. "Effects of strain on mechanical and electronic properties of borophene." *Materials Research Express* 4.4 (2017) : 045020.
- [226] B. Peng, H. Zhang, H. Shao, Z. Ning, Y. Xu, G. Ni, H. Lu, D. W. Zhang, H. Zhu. "Stability and strength of atomically thin borophene from first principles calculations." *Materials Research Letters* 5.6 (2017) : 399-407.
- [227] Q. Wei, X. Peng. "Superior mechanical flexibility of phosphorene and few-layer black phosphorus." *Applied Physics Letters* 104.25 (2014) : 251915.
- [228] B. Albert, H. Hillebrecht. "Boron : elementary challenge for experimenters and theoreticians." *Angewandte Chemie International Edition* 48.46 (2009) : 8640-8668.
- [229] X. Yang, Y. Ding, J. Ni. "Ab initio prediction of stable boron sheets and boron nanotubes : structure, stability, and electronic properties." *Physical Review B* 77.4 (2008) : 041402.
- [230] H. Tang, S. Ismail-Beigi. "Novel precursors for boron nanotubes : the competition of two-center and three-center bonding in boron sheets." *Physical review letters* 99.11 (2007) : 115501.
- [231] Q. Chen, W. J. Tian, L. Y. Feng, H. G. Lu, Y. W. Mu, H. J. Zhai, S. D. Li, L. S. Wang. "Planar B_{38}^- and B_{37}^- clusters with a double-hexagonal vacancy : molecular motifs for borophenes." *Nanoscale* 9.13 (2017) : 4550-4557.
- [232] Y. Liu, E. S. Penev, B. I. Yakobson. "Probing the synthesis of two-dimensional boron by first-principles computations." *Angewandte Chemie International Edition* 52.11 (2013) : 3156-3159.
- [233] H. Liu, J. Gao, J. Zhao. "From boron cluster to two-dimensional boron sheet on Cu (111) surface : growth mechanism and hole formation." *Scientific reports* 3.1 (2013) : 1-9.
- [234] L. Zhu, B. Zhao, T. Zhang, G. Chen, S. A. Yang. "How is honeycomb borophene stabilized on Al (111) ?." *The Journal of Physical Chemistry C* 123.23 (2019) : 14858-14864.
- [235] C. Park, J. E. Park, H. C. Choi. "Crystallization-induced properties from morphology-controlled organic crystals." *Accounts of chemical research* 47.8 (2014) : 2353-2364.

- [236] Y. I. Zhang, L. Zhang, C. Zhou. "Review of chemical vapor deposition of graphene and related applications." *Accounts of chemical research* 46.10 (2013) : 2329-2339.
- [237] J. Yu, J. Li, W. Zhang, H. Zhang. "Synthesis of high quality two-dimensional materials via chemical vapor deposition." *Chemical science* 6.12 (2015) : 6705-6716.
- [238] C. Tan, H. Zhang. "Wet-chemical synthesis and applications of non-layer structured two-dimensional nanomaterials." *Nature communications* 6.1 (2015) : 1-13.
- [239] Y. Wu, B. Yuan, M. Li, W. H. Zhang, Y. Liu, C. Li,. "Well-defined BiOCl colloidal ultrathin nanosheets : synthesis, characterization, and application in photocatalytic aerobic oxidation of secondary amines." *Chemical science* 6.3 (2015) : 1873-1878.
- [240] M. Ou, X. Wang, L. Yu, C. Liu, W. Tao, X. Ji, L. Mei,. "The emergence and evolution of borophene." *Advanced Science* 8.12 (2021) : 2001801.
- [241] M. Yi, Z. Shen. "A review on mechanical exfoliation for the scalable production of graphene." *Journal of Materials Chemistry A* 3.22 (2015) : 11700-11715.
- [242] V. Nicolosi, M. Chhowalla, M. G. Kanatzidis, M. S. Strano, J. N. Coleman,. "Liquid exfoliation of layered materials." *Science* 340.6139 (2013) : 1226419.
- [243] L. Yuwen, H. Yu, X. Yang, J. Zhou, Q. Zhang, Y. Zhang, Z. Luo, S. Su, L. Wang,. "Rapid preparation of single-layer transition metal dichalcogenide nanosheets via ultrasonication enhanced lithium intercalation." *Chemical communications* 52.3 (2016) : 529-532.
- [244] J. Zheng, H. Zhang, S. Dong, Y. Liu, C. T. Nai, H. S. Shin, H. Y. Jeong, B. Liu, K. P. Loh,. "High yield exfoliation of two-dimensional chalcogenides using sodium naphthalenide." *Nature communications* 5.1 (2014) : 1-7.
- [245] B. Anasori, Y. Xie, M. Beidaghi, J. Lu, B. C. Hosler, L. Hultman, P.R.C. Kent, Y. Gogotsi, M. W. Barsoum. "Two-dimensional, ordered, double transition metals carbides (MXenes)." *ACS nano* 9.10 (2015) : 9507-9516.
- [246] M. Naguib, J. Halim, J. Lu, K. M. Cook, L. Hultman, Y. Gogotsi, M. W. Barsoum,. "New two-dimensional niobium and vanadium carbides as promising materials for Li-ion batteries." *Journal of the American Chemical Society* 135.43 (2013) : 15966-15969.

- [247] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov,. "Electric field effect in atomically thin carbon films." *science* 306.5696 (2004) : 666-669.
- [248] A. K. Geim, K. S. Novoselov,. "The rise of graphene." *Nanoscience and technology : a collection of reviews from nature journals*. 2010. 11-19.
- [249] D. Jariwala, V. K. Sangwan, L. J. Lauhon, T. J. Marks, M. C. Hersam,. "Emerging device applications for semiconducting two-dimensional transition metal dichalcogenides." *ACS nano* 8.2 (2014) : 1102-1120.
- [250] L. Li, Y. Yu, G. J. Ye, Q. Ge, X. Ou, H. Wu, D. Feng, X. H. Chen, Y. Zhang,. "Black phosphorus field-effect transistors." *Nature nanotechnology* 9.5 (2014) : 372-377.
- [251] L. Tao, E. Cinquanta, D. Chiappe, C. Grazianetti, M. Fanciulli, M. Dubey, A. Molle, D. Akinwande,. "Silicene field-effect transistors operating at room temperature." *Nature nanotechnology* 10.3 (2015) : 227-231.
- [252] G. Bai, S. Yuan, Y. Zhao, Z. Yang, S. Y. Choi, Y. Chai, S. F. Yu, S. P. Lau, J. Hao,. "2D Layered Materials of Rare-Earth Er-Doped MoS₂ with NIR-to-NIR Down-and Up-Conversion Photoluminescence." *Advanced Materials* 28.34 (2016) : 7472-7477.
- [253] H. Li, X. Wang, X. Zhu, X. Duan, A. Pan. "Composition modulation in one-dimensional and two-dimensional chalcogenide semiconductor nanostructures." *Chemical Society Reviews* 47.20 (2018) : 7504-7521.
- [254] W. Huang, L. Gan, H. Li, Y. Ma, T. Zhai,. "2D layered group IIIA metal chalcogenides : synthesis, properties and applications in electronics and optoelectronics." *CrystEngComm* 18.22 (2016) : 3968-3984.
- [255] K. Xu, L. Yin, Y. Huang, T. A. Shifa, J. Chu, F. Wang, R. Cheng, Z. Wang, J. He. "Synthesis, properties and applications of 2d layered $M^{iii} X^{vi}$ (M= Ga, In ; X= S, Se, Te) materials." *Nanoscale* 8.38 (2016) : 16802-16818.
- [256] P. Hu, Z. Wen, L. Wang, P. Tan, K. Xiao,. "Synthesis of few-layer GaSe nanosheets for high performance photodetectors." *ACS nano* 6.7 (2012) : 5988-5994.
- [257] F. Liu, H. Shimotani, H. Shang, T. Kanagasekaran, V. Zolyomi, N. Drummond, V. I. Fal'ko, K. Tanigaki,. "High-sensitivity photodetectors based on multilayer GaTe flakes." *ACS nano* 8.1 (2014) : 752-760.

- [258] G. W. Mudd, S. A. Svatek, T. Ren, A. Patanè, O. Makarovskiy, L. Eaves, P. H. Beton, Z. D. Kovalyuk, G. V. Lashkarev, Z. R. Kudrynskyi, A. I. Dmitriev,. "Tuning the bandgap of exfoliated InSe nanosheets by quantum confinement." *Advanced Materials* 25.40 (2013) : 5714-5718.
- [259] J. O. Island, S. I. Blanter, M. Buscema, H.S.J. van der Zant, A. Castellanos-Gomez,. "Gate controlled photocurrent generation mechanisms in high-gain In_2Se_3 phototransistors." *Nano letters* 15.12 (2015) : 7853-7858.
- [260] W. Huang, L. Gan, H. Yang, N. Zhou, R. Wang, W. Wu, H. Li, Y. Ma, H. Zeng, T. Zhai,. "Controlled synthesis of ultrathin 2D $\beta - In_2S_3$ with broadband photoresponse by chemical vapor deposition." *Advanced Functional Materials* 27.36 (2017) : 1702448.
- [261] G. Han, Z. G. Chen, C. Sun, L. Yang, L. Cheng, Z. Li, W. Lu, Z. M. Gibbs, G. J. Snyder, K. Jack, J. Drennan, J. Zou,. "A new crystal : layer-structured rhombohedral In_3Se_4 ." *CrystEngComm* 16.3 (2014) : 393-398.
- [262] S. Lei, L. Ge, S. Najmaei, A. George, R. Kappera, J. Lou, M. Chhowalla, H. Yamaguchi, G. Gupta, R. Vajtai, A. D. Mohite, P. M. Ajayan,. "Evolution of the electronic band structure and efficient photo-detection in atomic layers of InSe." *ACS nano* 8.2 (2014) : 1263-1272.
- [263] H. Wang, G. Qin, J. Yang, Z. Qin, Y. Yao, Q. Wang, M. Hu,. "First-principles study of electronic, optical and thermal transport properties of group III–VI monolayer MX (M= Ga, In; X= S, Se)." *Journal of Applied Physics* 125.24 (2019) : 245104.
- [264] S. Demirci, N. Avazli, E. Durgun, S. Cahangirov,. "Structural and electronic properties of monolayer group III monochalcogenides." *Physical Review B* 95.11 (2017) : 115409.
- [265] J. W. Jiang, H. S. Park, T. Rabczuk,. "Molecular dynamics simulations of single-layer molybdenum disulphide (MoS_2) : Stillinger-Weber parametrization, mechanical properties, and thermal conductivity." *Journal of Applied Physics* 114.6 (2013) : 064307.
- [266] M. Yagmurcukardes, R. T. Senger, F. M. Peeters, H. Sahin,. "Mechanical properties of monolayer GaS and GaSe crystals." *Physical Review B* 94.24 (2016) : 245407.

- [267] J. Zhou, J. Shi, Q. Zeng, Y. Chen, L. Niu, F. Liu, T. Yu, K. Suenaga, X. Liu, J. Lin, Z. Liu,. "InSe monolayer : synthesis, structure and ultra-high second-harmonic generation." 2D Materials 5.2 (2018) : 025019.
- [268] D. Liu, W. Zhang, D. Mou, J. He, Y. B. Ou, Q. Y. Wang, Z. Li, L. Wang, L. Zhao, S. He, Y. Peng, X. Liu, C. Chen, L. Yu, G. Liu, X. Dong, J. Zhang, C. Chen, Z. Xu, J. Hu, X. Chen, X. Ma, Q. Xue, X. J. Zhou,. "Electronic origin of high-temperature superconductivity in single-layer FeSe superconductor." Nature communications 3.1 (2012) : 1-6.
- [269] M. Lin, D. Wu, Y. Zhou, W. Huang, W. Jiang, W. Zheng, S. Zhao, C. Jin, Y. Guo, H. Peng, Z. Liu,. "Controlled growth of atomically thin In_2Se_3 flakes by van der Waals epitaxy." Journal of the American Chemical Society 135.36 (2013) : 13274-13277.
- [270] Y. Zhou, Y. Nie, Y. Liu, K. Yan, J. Hong, C. Jin, Y. Zhou, J. Yin, Z. Liu , H. Peng,. "Epitaxy and photoresponse of two-dimensional GaSe crystals on flexible transparent mica sheets." ACS nano 8.2 (2014) : 1485-1490.
- [271] W. Zheng, T. Xie, Y. Zhou, Y. L. Chen, W. Jiang, S. Zhao, J. Wu, Y. Jing, Y. Wu, G. Chen, Y. Guo, J. Yin, S. Huang, H. Q. Xu, Z. Liu, H. Peng,. "Patterning two-dimensional chalcogenide crystals of Bi_2Se_3 and In_2Se_3 and efficient photodetectors." Nature Communications 6.1 (2015) : 1-8.
- [272] Y. Xia and G. M. Whitesides. 1998. "Soft Lithography." Angew. Chem. Int. Ed. Engl., 37, Pp. 550-575.
- [273] Q. Guo, N. Chen, L. Qu,. "Two-dimensional materials of group-IVA boosting the development of energy storage and conversion." Carbon Energy 2.1 (2020) : 54-71.
- [274] J. Zhao, D. Ma, C. Wang, Z. Guo, B. Zhang, J. Li, G. Nie, N. Xie, H. Zhang,. "Recent advances in anisotropic two-dimensional materials and device applications." Nano Research 14.4 (2021) : 897-919.
- [275] R. Qin, C. H. Wang, W. Zhu, Y. Zhang,. "First-principles calculations of mechanical and electronic properties of silicene under strain." Aip Advances 2.2 (2012) : 022159.
- [276] N. T. Nguyen,. "Silicene transistors : silicon-based nanoelectronics from a single atom layer." Micro and Nanosystems 6.4 (2014) : 205-206.

- [277] L.C.L.Y. Voon, G. G. Guzmán-Verri. "Is silicene the next graphene?." MRS bulletin 39.4 (2014) : 366-373.
- [278] AEH. Love. "A Treatise on the Mathematical Theory of Elasticity." Bull. Amer. Math. Soc 16 (1909) : 90-92.
- [279] P. Li, C. Jiang, S. Xu, Y. Zhuang, L. Gao, A. Hu, H. Wang, Y. Lu, "In situ nano-mechanical characterization of multi-layer MoS₂ membranes : from intraplanar to interplanar fracture." Nanoscale 9.26 (2017) : 9119-9128.
- [280] P. Xu, Z. Yu, C. Yang, P. Lu, Y. Liu, H. Ye, T. Gao. "Comparative study on the nonlinear properties of bilayer graphene and silicene under tension." Superlattices and Microstructures 75 (2014) : 647-656.
- [281] J. E. Padilha, R. H. Miwa, A. Fazzio,. "Directional dependence of the electronic and transport properties of 2D borophene and borophane." Physical Chemistry Chemical Physics 18.36 (2016) : 25491-25496.
- [282] L. Li, J. Yang. "On mechanical behaviors of few-layer black phosphorus." Scientific reports 8.1 (2018) : 1-8.
- [283] Z.D. Sha, Q.X. Pei, Y.Y. Zhang, Y.W. Zhang., "Atomic vacancies significantly degrade the mechanical properties of phosphorene." Nanotechnology 27.31 (2016) : 315704.
- [284] N. Jing, Q. Xue, C. Ling, M. Shan, T. Zhang, X. Zhou, Z. Jiao., Effect of defects on Young's modulus of graphene sheets : a molecular dynamics simulation. Rsc Advances 2.24 (2012) : 9124-9129.
- [285] T. Sun, G. Zhang, D. Xu, X. Lian, H. Li, W. Chen, C. Su., "Defect chemistry in 2D materials for electrocatalysis." Materials Today Energy 12 (2019) : 215-238.
- [286] D. Yan, Y. Li, J. Huo, R. Chen, L. Dai, S. Wang., "Defect chemistry of nonprecious-metal electrocatalysts for oxygen reactions." Advanced materials 29.48 (2017) : 1606459.
- [287] Y. Liu, X. Chen., "Mechanical properties of nanoporous graphene membrane." Journal of Applied Physics 115.3 (2014) : 034303
- [288] V.T. Pham, T.H. Fang., "Understanding porosity and temperature induced variabilities in interface, mechanical characteristics and thermal conductivity of borophene membranes." Scientific reports 11.1 (2021) : 1-14.

- [289] A.A. Anastasi, K. Ritos, G. Cassar, M.K. Borg., "Mechanical properties of pristine and nanoporous graphene." *Molecular Simulation* 42.18 (2016) : 1502-1511.
- [290] M. Ippolito, A. Mattoni, L. Colombo, F. Cleri., "Fracture toughness of nanostructured silicon carbide." *Applied Physics Letters* 87.14 (2005) : 141912.
- [291] F. Cleri, S.R. Phillpot, D. Wolf, S. Yip., "Atomistic simulations of materials fracture and the link between atomic and continuum length scales." *Journal of the American Ceramic Society* 81.3 (1998) : 501-516.
- [292] T. L. Anderson., *Fracture mechanics : fundamentals and applications* . CRC press, 2017.
- [293] G. Pluvinage, L. Milovic., *Fracture at all Scales*. Springer International Publishing, 2017.
- [294] M. Q. Le, R. C. Batra., "Mode-I stress intensity factor in single layer graphene sheets." *Computational Materials Science* 118 (2016) : 251-258.
- [295] T. Rakib, S. Saha, M. Motalab, S. Mojumder, M.M. Islam., "Atomistic representation of anomalies in the failure behaviour of nanocrystalline silicene." *Scientific reports* 7.1 (2017) : 1-12.

Résumé

Cette thèse est une contribution à l'étude de la réponse thermomécanique et des propriétés intrinsèques et extrinsèques de certaines classes de matériaux bidimensionnels en particulier, les matériaux hybrides à base de silicène, de borophène et de monochalcogénures, par la dynamique moléculaire. À ce propos, Nous avons focalisé sur le comportement élastique des nanomatériaux qui est la base de la détermination des propriétés mécaniques telles que, le module de Young, le coefficient de Poisson, la résistance à la traction et la déformation de rupture. À la lumière du rôle critique de la gestion de la température dans les nanodispositifs et dans le contrôle des performances et de la stabilité de ces dispositifs, nous avons débattu de l'influence d'une large gamme de température sur les propriétés thermomécaniques et structurales de ces matériaux hybrides. Afin de maximiser la fonctionnalité des matériaux 2D, une compréhension approfondie et une manipulation précise des défauts s'impose. Dans ce sens, nous abordons plusieurs types des défauts tels que les fissures et les nanopores qui influencent les propriétés intrinsèques des matériaux. Une attention particulière a été apportée aux stratégies d'ingénierie des contraintes pour réduire les dommages qu'ils causent par les défauts précités, et améliorer leurs propriétés mécaniques, afin d'en tirer profit. Toutes nos contributions dans le domaine ont montré des résultats avec un impact significatif, ce qui ouvre la porte vers une utilisation dans des applications extensibles et de futurs dispositifs thermomécaniques.

Mots-clefs : 2D-SiC, 2D-SiGe, monochalcogénures monocouches, borophène, propriétés thermomécaniques, constantes élastiques, fissures, nanopores, dynamique moléculaire.

Abstract

This thesis is a contribution to the study of the thermomechanical response and the intrinsic and extrinsic properties of some classes of two-dimensional materials in particular, hybrid materials based on silicene, borophene and monochalcogenides, by molecular dynamics. In this regard, we focused on the elastic behavior of nanomaterials which is the basis for the determination of mechanical properties such as, Young's modulus, Poisson's ratio, tensile strength and failure strain. In light of the critical role of temperature management in nanodevices and in controlling the performance and stability of these devices, we discussed the influence of a wide temperature range on the thermomechanical and structural properties of these hybrid materials. In order to maximize the functionality of 2D materials, a thorough understanding and accurate manipulation of defects is required. In this sense, we address several types of defects such as cracks and nanopores that influence the intrinsic properties of the materials. Particular attention has been paid to stress engineering strategies to reduce the damage caused by the aforementioned defects, and to improve their mechanical properties, in order to benefit from them. All our contributions in this area have shown results with significant impact, which opens the door to use in scalable applications and future thermomechanical devices.

Keywords: 2D-SiC, 2D-SiGe, monolayer monochalcogenides, borophene, thermomechanical properties, elastic constants, cracks, nanopores, molecular dynamics (MD)