

## 层状二硫化钼热应力数值模拟

林忠涛<sup>1</sup>, 龙连春<sup>1</sup>, 杨洋<sup>2\*</sup>, 刘吴国<sup>2</sup><sup>1</sup>北京工业大学材料与制造学部, 北京 100124;<sup>2</sup>中国科学院物理研究所, 北京 100089

**摘要** 利用有限元方法对 SiO<sub>2</sub> 基层状二硫化钼 (MoS<sub>2</sub>) 的热应力进行模拟分析。对衬底上有无微米孔的两种模型分别进行建模, 模拟热应力的分布情况, 并比较两种模型的热应力; 分析热应力与温度、MoS<sub>2</sub> 层厚、衬底厚度的关系。模拟结果表明: 衬底支撑的 MoS<sub>2</sub> 热应力整体大于悬空 MoS<sub>2</sub> 的热应力; 悬空 MoS<sub>2</sub> 周围衬底支撑部分的热应力明显高于悬空部分的热应力。研究表明, 随着温度的降低、MoS<sub>2</sub> 厚度的减小以及衬底厚度的增加, MoS<sub>2</sub> 的热应力均增大。

**关键词** 材料; 二硫化钼; 热应力; 数值模拟; 非线性; 参数影响分析

中图分类号 TB43

文献标志码 A

doi: 10.3788/LOP202158.1516028

## Numerical Simulation of the Thermal Stresses of Layered Molybdenum Disulfide

Lin Zhongtao<sup>1</sup>, Long Lianchun<sup>1</sup>, Yang Yang<sup>2\*</sup>, Liu Wuguo<sup>2</sup><sup>1</sup>Faculty of Materials and Manufacturing, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China;<sup>2</sup>Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100089, China

**Abstract** In this study, the finite element method was used to simulate and analyze thermal stresses of molybdenum disulfide (MoS<sub>2</sub>). Two models with or without microsized holes on the substrate were developed to simulate the distribution of thermal stresses, and thermal stresses of the two models were compared. Relationships between thermal stresses and temperature, MoS<sub>2</sub> layer thickness, and substrate thickness were analyzed. The thermal stress of the substrate supported MoS<sub>2</sub> was larger than that of the suspended MoS<sub>2</sub>. Moreover, the thermal stress of the MoS<sub>2</sub> surrounding the suspended MoS<sub>2</sub> was higher than that of the suspended part. Our results demonstrate that the thermal stresses of MoS<sub>2</sub> increased with decrease in temperature, decrease in MoS<sub>2</sub> thickness, and increase in substrate thickness.

**Key words** materials; molybdenum disulfide; thermal stress; numerical simulation; nonlinear; parameter impact analysis

**OCIS codes** 310.4925; 000.6850; 160.3380

## 1 引言

二维材料因其独特的结构和优异的性能在多个领域具有良好的应用前景<sup>[1-6]</sup>。二硫化钼 (MoS<sub>2</sub>) 作

为一种典型的二维过渡金属硫化物, 较高的电子迁移率和独一无二的带隙结构使其具有优异的光电性能<sup>[7]</sup>。层状 MoS<sub>2</sub> 是间接带隙半导体, 随着层数的减少, 其间接带隙和直接带隙交绕, 在单层的极限

收稿日期: 2020-11-18; 修回日期: 2021-01-06; 录用日期: 2021-01-20

基金项目: 国家重点研发计划 (2018YFB0703500)、国家自然科学基金青年科学基金 (11704401)

通信作者: \*yang.yang@iphy.ac.cn

情况下则变成直接带隙半导体<sup>[8-9]</sup>。直接带隙的存在使得基于材料设计的场效应管有较高的电流开关比,单层 MoS<sub>2</sub> 半导体的开关比可达 10<sup>8</sup>, 室温下的电子迁移率大于 200 cm<sup>2</sup>·V<sup>-1</sup>·s<sup>-1</sup><sup>[10-11]</sup>, 这使得 MoS<sub>2</sub> 可应用于具有高响应率的光探测器和 LED 领域<sup>[12]</sup>。

近年来,不少学者对薄膜应力的成因和分布情况进行了研究。当同一种材料内部受热不均,或两种材料的热膨胀系数不同时,材料内部产生热应力,热应力超过材料的承载极限时会导致材料开裂失效<sup>[13-15]</sup>。同样,二氧化硅(SiO<sub>2</sub>)衬底和层状 MoS<sub>2</sub> 的热膨胀系数存在差异,导致 MoS<sub>2</sub> 在降温过程中在表面出现较大的拉应力,从而导致薄膜塑性变形,内部应力增大。伴随着元器件的发展,热应力成为影响材料性能的重要因素,因为多层薄膜结构热应力理论计算难度大<sup>[16]</sup>,现多采用有限元软件进行数值仿真分析<sup>[17-18]</sup>。董位等<sup>[19-20]</sup>对蓝宝石衬底上氮化镓(GaN)外延薄膜在冷却阶段的热应力进行分析,发现沉积温度和薄膜厚度对 GaN 外延薄膜应力的影响较大。吴亚俊等<sup>[21]</sup>通过有限元分析方法模拟了 MoS<sub>2</sub> 薄膜在不同的衬底上施加 1% 的横向广义平面应变条件下的总应变场分布,研究了衬底材料的杨氏模量和泊松比与 MoS<sub>2</sub> 的应变分布之间的关系。刘娟等<sup>[22]</sup>开展了 MoS<sub>2</sub> 涂层在扭动微动下摩擦力学性能的有限元分析,研究扭转角位移幅值、法向载荷、摩擦因数等对 MoS<sub>2</sub> 涂层接触表面力学行为的影响。郭学敏等<sup>[23]</sup>分析了三层薄膜结构在完整衬底上的热应力分布情况,得到不同镀膜温度、膜厚、基底厚度等条件下的热应力变化趋势。王小增<sup>[24]</sup>的研究表明薄膜热应力的影响因素按重要程度排序,依次为沉积温度、薄膜厚度、衬底厚度、衬底直径。以往研究中缺乏对 MoS<sub>2</sub> 热应力的分析,其他材料的热应力分析都是建立在完整衬底

上,而对层状悬空 MoS<sub>2</sub> 在降温过程中因热失配造成的热应力鲜有报道,多数学者把悬空的 MoS<sub>2</sub> 当作不受应力的情况来对待。因此,本文在悬空衬底上对层状 MoS<sub>2</sub> 进行热应力分析,量化衬底效应对层状 MoS<sub>2</sub> 性能的影响。

近年来,很多学者致力于悬空器件的研发,其电阻小、热功耗低等特点体现了这类器件的优越性和应用潜能<sup>[25-26]</sup>。Yan 等<sup>[27]</sup>首次报道了悬空单层 MoS<sub>2</sub> 的温度依赖性拉曼光谱和室温下悬空单层 MoS<sub>2</sub> 的热导率,为单层 MoS<sub>2</sub> 的热力学性质提供了重要信息。Tian 等<sup>[28]</sup>对悬浮在圆孔上的石墨烯进行专门的拉曼研究,证明了不能忽略悬空器件中由石墨烯和衬底的热膨胀系数失配引起的应变。因此,本文以 SiO<sub>2</sub> 衬底层状 MoS<sub>2</sub> 为研究对象,建立力-热顺序耦合分析模型,利用有限元分析方法对层状 MoS<sub>2</sub> 在冷却阶段产生的热应力进行数值模拟分析,对比分析悬空 MoS<sub>2</sub> 和衬底支撑 MoS<sub>2</sub> 的热应力,以及悬空 MoS<sub>2</sub> 的悬空部分和衬底部分的热应力大小和分布情况,并分析了样品温度、MoS<sub>2</sub> 层厚、衬底厚度对 MoS<sub>2</sub> 热应力的影响。

## 2 MoS<sub>2</sub> 热应力有限元分析模型

### 2.1 几何模型

采用 COMSOL 有限元分析软件对层状 MoS<sub>2</sub> 热应力进行数值模拟分析。衬底支撑的 MoS<sub>2</sub> 和悬空 MoS<sub>2</sub> 的模型如图 1 所示,采用 8 μm × 8 μm 方形多层膜作为模型,MoS<sub>2</sub> 厚度为  $t$ ,取值为 0.7<sup>[29]</sup>, 1.4, 2.1, 2.8, 3.5 nm, 分别对应 1、2、3、4、5 的不同层厚。衬底厚度为  $h$ , 分别对应 50, 75, 100, 125, 150 nm 的衬底厚度。图 1(a) 所示为衬底支撑的 MoS<sub>2</sub> 模型,层状 MoS<sub>2</sub> 附着在完整的 SiO<sub>2</sub> 衬底上,图 1(b) 所示为悬空 MoS<sub>2</sub> 模型,衬底上开有微米孔,半径为

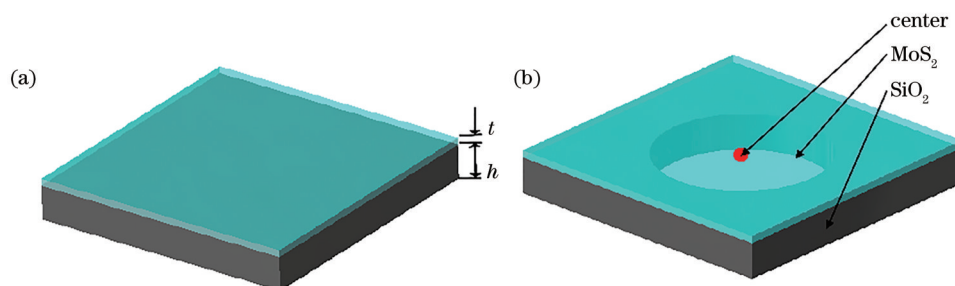


图 1 SiO<sub>2</sub> 基 MoS<sub>2</sub> 薄膜模型示意图。(a) 衬底 MoS<sub>2</sub> 模型示意图;(b) 悬空 MoS<sub>2</sub> 模型示意图

Fig. 1 Schematic of SiO<sub>2</sub> based MoS<sub>2</sub> film model. (a) Schematic of substrate supported MoS<sub>2</sub> model;

(b) schematic of the suspended MoS<sub>2</sub> model

2.5 μm。根据实验所需的温度变化情况,样品温度从 297 K 开始降低,最后稳定于 100 K。

在建模过程中进行网格划分网格是六面体网格,由于圆孔边缘网格比较密,因此六面体边长大小不一,最大的网格单元为 0.8 μm,最小的网格单元为 0.144 μm。先对 SiO<sub>2</sub> 基底进行映射以及扫掠,得到 5 层六面体网格;然后对层状 MoS<sub>2</sub> 进行映射和扫掠,得到一层六面体网格。分析计算过程中,固体力学与固体传热模块耦合作用,故采用瞬态分析;考虑到材料的部分物性参数随温度变化,固体力学模块中采用刚体运动抑制约束,这种约束方式可以很好地改善在计算热膨胀问题时出现的无法

收敛情况,过程中可能出现刚体运动的位移不同,但是应力和应变是相同的,这既解决了计算无法收敛的问题,又节省了计算时间。固体传热模块中采用热通量边界条件,这种对流热通量可以用对流传热方程描述,即

$$q_0 = h \cdot (T_{\text{ext}} - T), \quad (1)$$

式中:  $q_0$  为环境对模型传递的热量;  $h$  为换热系数;  $T_{\text{ext}}$  为环境温度;  $T$  为模型温度。

## 2.2 材料参数

仿真分析过程中,材料的物性参数如表 1 所示。MoS<sub>2</sub> 的恒压热容和 SiO<sub>2</sub> 的相关物性参数来自 COMSOL 软件的内置参数。

表 1 材料的物性参数

Table 1 Physical properties of materials

| Material  | MoS <sub>2</sub>   | SiO <sub>2</sub>   |
|---|--|--|
| Thermal expansion coefficient /K <sup>-1</sup>                              | $10^{-7} + 3.5 \times 10^{-8} \times T - 3.9 \times 10^{-11} \times T^2, 100 \leq T \leq 500$ <sup>[30]</sup>  | $-1.7 \times 10^{-6} + 1.5 \times 10^{-8} \times T - 3.3 \times 10^{-11} \times T^2 + 3.2 \times 10^{-14} \times T^3 - 1.2 \times 10^{-17} \times T^4, 100 \leq T \leq 500$  |
| Thermal conductivity / (W·m <sup>-1</sup> ·K <sup>-1</sup> )                | 104.7 <sup>[31]</sup>  | $\begin{cases} 0.1 + 4.3 \times 10^{-5} \times T^2 - 2.3 \times 10^{-7} \times T^3 + 3 \times 10^{-10} \times T^4, 50 \leq T < 280 \\ -0.1 - 5.3 \times 10^{-5} \times T^2 + 7.6 \times 10^{-8} \times T^3 - 5.06 \times 10^{-11} \times T^4 + 1.3 \times 10^{-14} \times T^5, 280 \leq T \leq 500 \end{cases}$  |
| Density / (Kg·m <sup>-3</sup> )   | 4800 <sup>[32]</sup>   | $2219.4 - 4.7 \times 10^{-5} \times T^2 + 7 \times 10^{-8} \times T^3 - 11 \times 10^{-11} \times T^4 + 1.4 \times 10^{-14} \times T^5, 100 \leq T \leq 500$   |
| Young modulus /GPa  | 229 <sup>[33]</sup>  | $\begin{cases} 7.8 - 8 \times 10^7 \times T + 1200039 \times T^2 - 7440.2 \times T^3 + 22 \times 10^{-6} \times T^4, 100 \leq T \leq 170 \\ 7 \times 10^{-10} + 1.2 \times 10^7 \times T + 11447.5 \times T^2 - 26 \times T^3 - 3 \times 10^{-6} \times T^5, 170 \leq T \leq 500 \end{cases}$  |
| Poisson's ratio   | 0.25 <sup>[33]</sup>   | $\begin{cases} 0.2 - 3.5 \times 10^{-4} \times T + 5.4 \times 10^{-6} \times T^2 - 2.8 \times 10^{-8} \times T^3 + 4.9 \times 10^{-11} \times T^4, 100 \leq T < 170 \\ 0.1 + 2.3 \times 10^{-4} \times T - 9.3 \times 10^{-7} \times T^2 + 1.8 \times 10^{-9} \times T^3 - 1.6 \times 10^{-12} \times T^4 + 5.4 \times 10^{-16} \times T^5, 170 \leq T \leq 500 \end{cases}$ |
| Heat capacity at constant pressure / (J·kg <sup>-1</sup> ·K <sup>-1</sup> ) | $-235.1 + 5.5 \times T - 0.01 \times T^2 + 4 \times 10^{-5} \times T^3 - 4.6 \times 10^{-8} \times T^4 + 2.9 \times 10^{-11} \times T^5 - 7.4 \times 10^{-15} \times T^6, 100 \leq T \leq 500$ | $61.5 + 1.9 \times T - 1.7 \times 10^{-5} \times T^3 + 1.9 \times 10^{-8} \times T^4 - 7.1 \times 10^{-12} \times T^5, 100 \leq T \leq 500$  |

## 3 结果与讨论

衬底 SiO<sub>2</sub> 与层状 MoS<sub>2</sub> 热膨胀系数不同所导致的热失配是产生热应力的决定性因素,如图 2(a) 所示,实线和虚线分别为单层 MoS<sub>2</sub> 和体块 SiO<sub>2</sub> 在 100~500 K 的热膨胀系数变化曲线。由于 SiO<sub>2</sub> 的热膨胀系数小于 MoS<sub>2</sub> 的热膨胀系数,在冷却过程中,MoS<sub>2</sub> 收缩较快,而 SiO<sub>2</sub> 衬底收缩较慢,因此衬底抑制了 MoS<sub>2</sub> 的收缩,MoS<sub>2</sub> 受到来自衬底的拉应力。

图 2(b) 所示为 MoS<sub>2</sub> 和 SiO<sub>2</sub> 热膨胀系数随温度变化的梯度曲线,在 100~300 K 温度区间,MoS<sub>2</sub> 热膨胀系数比 SiO<sub>2</sub> 热膨胀系数随温度升高得更快。

### 3.1 MoS<sub>2</sub> 热应力的分布情况

利用有限元分析方法模拟单层 MoS<sub>2</sub> 在 150 nm 厚的衬底上样品温度从 293 K 降到 100 K 并稳定,悬空与衬底 MoS<sub>2</sub> 薄膜的应力分布如图 3 所示。图 3(a)、(b) 所示为在室温 293 K 下悬空与衬底支撑 MoS<sub>2</sub> 的应力分布,可以看到,几乎没有应力。

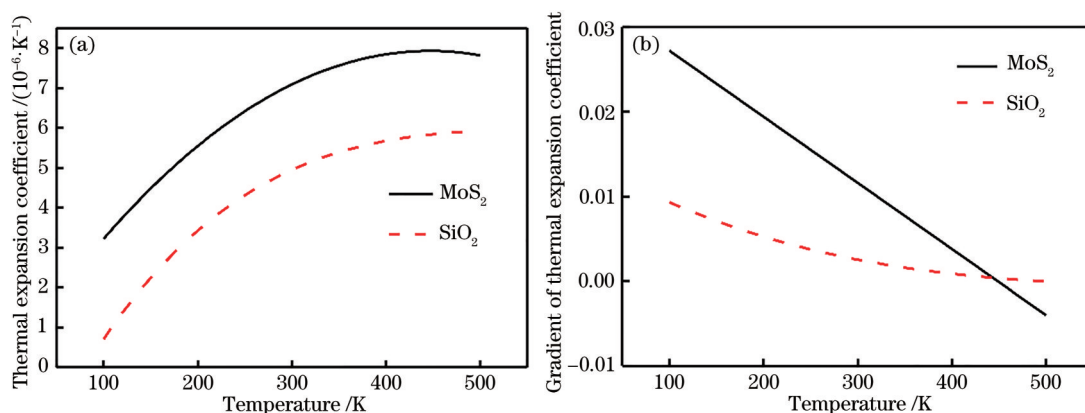


图 2  $\text{MoS}_2$ 和 $\text{SiO}_2$ 的热膨胀系数。(a)热膨胀系数随温度的变化曲线;(b)热膨胀系数随温度变化的梯度曲线  
 Fig. 2 Thermal expansion coefficients of  $\text{MoS}_2$  and  $\text{SiO}_2$ . (a) Thermal expansion coefficient as a function of temperature; (b) gradient of thermal expansion coefficient changed with temperature

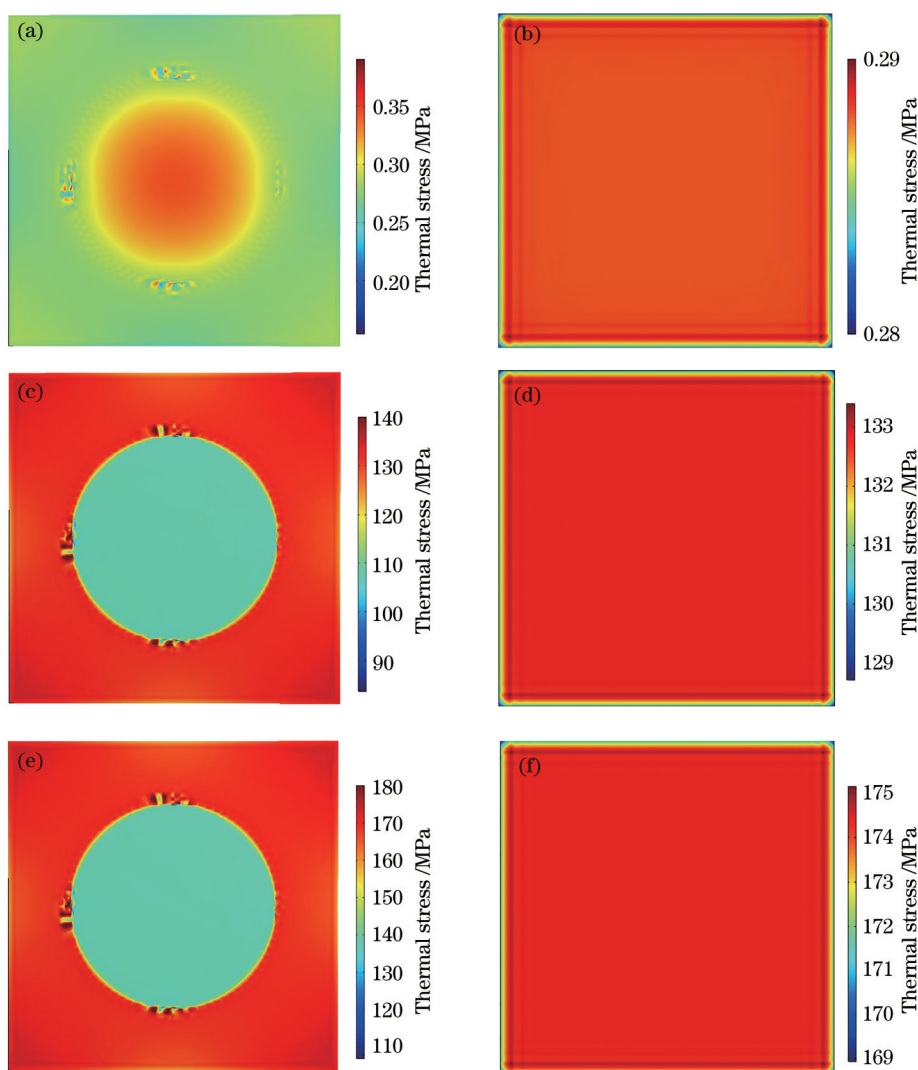


图 3 热应力分布。(a)293 K,悬空  $\text{MoS}_2$ ;(b)293 K,衬底支撑  $\text{MoS}_2$ ;(c)200 K,悬空  $\text{MoS}_2$ ;(d)200 K,衬底支撑  $\text{MoS}_2$ ;  
 (e)100 K,悬空  $\text{MoS}_2$ ;(f)100 K,衬底支撑  $\text{MoS}_2$

Fig. 3 Thermal stress distribution. (a) Suspended  $\text{MoS}_2$  at 293 K; (b) substrate supported  $\text{MoS}_2$  at 293 K; (c) suspended  $\text{MoS}_2$  at 200 K; (d) substrate supported  $\text{MoS}_2$  at 200 K; (e) suspended  $\text{MoS}_2$  at 100 K; (f) substrate supported  $\text{MoS}_2$  at 100 K

图 3(c)、(d)是在 200 K 下悬空与衬底支撑 MoS<sub>2</sub> 的应力分布。从图 3(c) 可以看到,悬空部分的 MoS<sub>2</sub> 应力均匀分布,并且低于衬底部分 MoS<sub>2</sub> 的应力;从图 3(d) 可以看到,整块 MoS<sub>2</sub> 的应力同样是均匀分布。比较图 3(c)、(d) 可得,由于没有来自衬底的束缚,悬空部分的 MoS<sub>2</sub> 受到的应力是最小的,衬底支撑的 MoS<sub>2</sub> 受到的应力是最大的。图 3(e)、(f) 是在 100 K 下悬空与衬底支撑 MoS<sub>2</sub> 的应力分布,随着温度的降低,应力进一步增大,但本质上与 200 K 下的情况无差别。

温度为 100 K 时单层 MoS<sub>2</sub> 上表面从中心到边界的应力分布曲线如图 4 所示,由此可以看出,模拟计算得到的 MoS<sub>2</sub> 应力是拉应力,衬底支撑 MoS<sub>2</sub> 中心点的 Mises 应力值为 175 MPa,悬空 MoS<sub>2</sub> 中心点 Mises 应力值为 138 MPa,在圆孔与衬底交界处薄膜应力急剧上升,显然悬空样品中心点的热应力小于衬底中心点的热应力。从图 4 还可以看到,悬空 MoS<sub>2</sub> 在 2.5 μm 处出现陡直突变的现象,这可归因于衬底上圆孔边缘的应力集中。

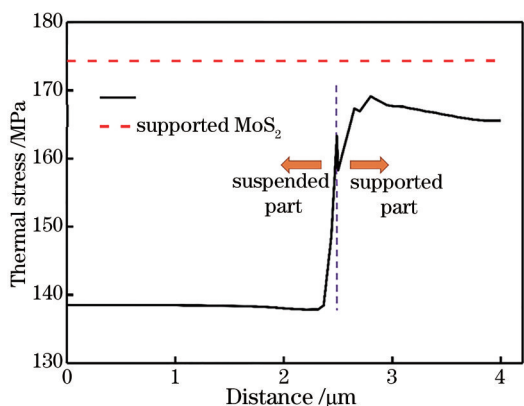


图 4 MoS<sub>2</sub> 从中心到边界的热应力分布

Fig. 4 Thermal stress distribution in MoS<sub>2</sub> from the center to the edge

### 3.2 MoS<sub>2</sub> 热应力与温度、MoS<sub>2</sub> 厚度以及衬底厚度的关系

为了解 MoS<sub>2</sub> 中热应力与温度的关系,在模拟过程中,温度不断降低,记录下相应的热应力值,并将悬空样品的应力值与衬底上的相应热应力进行对比,模拟的温度变化范围为 293 ~ 100 K。如图 5 所示,随着样品温度的降低,MoS<sub>2</sub> 热应力逐渐增大,衬底支撑的 MoS<sub>2</sub> 热应力的变化更快一些,当温度低于 150 K 时,热应力不再继续增大,衬底支撑的 MoS<sub>2</sub> 热应力整体大于悬空的 MoS<sub>2</sub> 热应力。由于衬底与 MoS<sub>2</sub> 之间存在热失配,悬空 MoS<sub>2</sub> 上热失配产生的应变小于衬底

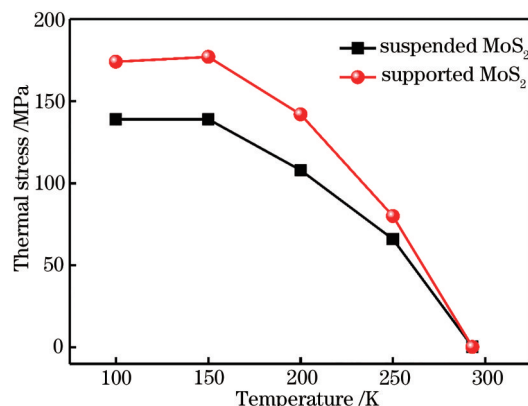


图 5 中心点应力与温度的关系

Fig. 5 Temperature dependence of the thermal stress at central point of MoS<sub>2</sub>

支撑 MoS<sub>2</sub> 上热失配产生的应变,因此悬空 MoS<sub>2</sub> 中心点的应力小于衬底 MoS<sub>2</sub> 中心点的热应力。

已有文献报道,少层 MoS<sub>2</sub> 可用来制作一种柔性晶体管阵列,这种柔性晶体管阵列可以用作高灵敏度的气体传感器,少层 MoS<sub>2</sub> 在电子传感器中的成功应用预示着它在各种电子器件中具有潜在的应用价值<sup>[34]</sup>。为了解 MoS<sub>2</sub> 中热应力与厚度的关系,保持衬底厚度 100 nm 不变,模型中层状 MoS<sub>2</sub> 厚度设置为 0.7, 1.4, 2.1, 2.8, 3.5 nm, 分别对应 1、2、3、4、5 层 MoS<sub>2</sub>, 其他材料参数不变,边界条件及施加的温度、载荷都不变,分别进行模拟仿真计算,结果如图 6 所示。可以看到,随着 MoS<sub>2</sub> 厚度的增加,衬底支撑 MoS<sub>2</sub> 热应力和悬空 MoS<sub>2</sub> 热应力都逐渐减小,而且悬空 MoS<sub>2</sub> 热应力下降的趋势更加明显。

为了解热应力与衬底厚度的关系,保持 MoS<sub>2</sub> 厚度 0.7 nm 不变,衬底厚度设置为 50, 75, 100, 125,

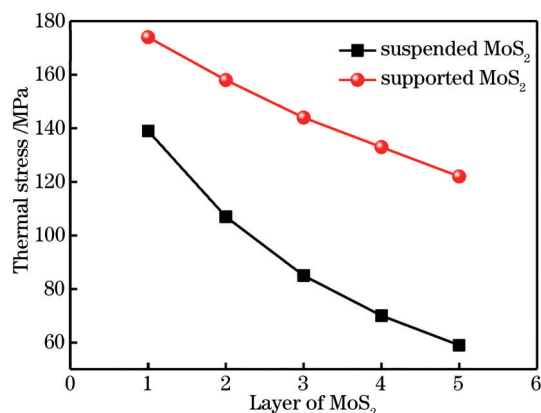


图 6 中心点应力与 MoS<sub>2</sub> 层厚的关系

Fig. 6 Thickness dependence of the thermal stress at the central point of MoS<sub>2</sub>

150 nm,其他材料参数、边界条件及施加的温度、载荷都不变,分别进行模拟仿真计算,结果如图7(a)所示。可以看到,随着衬底厚度的增加,悬空 MoS<sub>2</sub>的热应力

和衬底支撑 MoS<sub>2</sub>的热应力都逐渐增大。值得注意的是,悬空 MoS<sub>2</sub>热应力增加的趋势更加明显,如图7(b)所示。由此可见,衬底厚度越薄,热应力就越小。

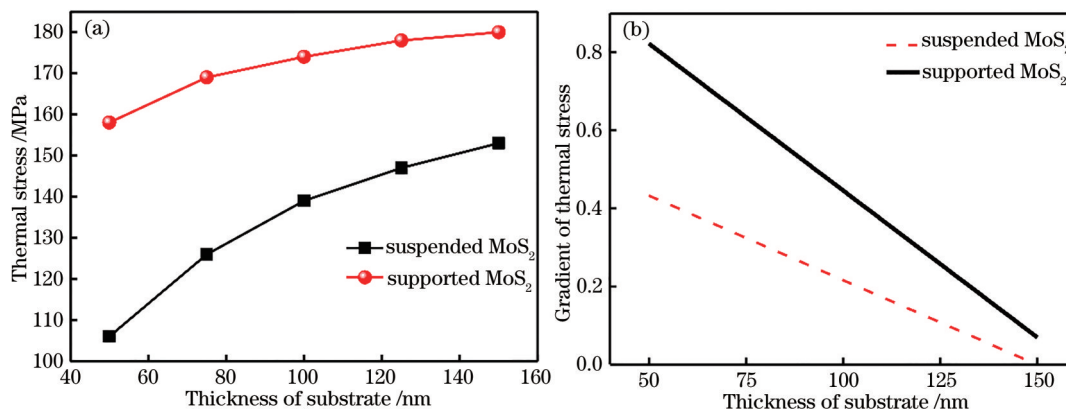


图7 MoS<sub>2</sub>的中心点应力分布。(a)中心点应力与衬底厚度的关系 (b)中心点应力随衬底厚度的梯度关系  
Fig. 7 Thermal stress distribution at central point of MoS<sub>2</sub>. (a) The dependence of the thermal stress at central point on the thickness of substrate; (b) gradient of the thermal stress at central point as a function of the thickness of substrate

## 4 结 论

利用有限元分析方法对 SiO<sub>2</sub>衬底上层状 MoS<sub>2</sub>的热应力进行数值仿真模拟,得到层状 MoS<sub>2</sub>应力值及应力分布情况,分析应力与温度、MoS<sub>2</sub>厚度、衬底厚度的关系,并对悬空 MoS<sub>2</sub>和衬底支撑 MoS<sub>2</sub>的热应力进行对比,得到以下结论:衬底支撑 MoS<sub>2</sub>的热应力分布较均匀,受到衬底束缚作用最大,而悬空 MoS<sub>2</sub>的热应力分布比较复杂,圆孔与衬底结合处 MoS<sub>2</sub>热应力变化明显,悬空 MoS<sub>2</sub>无衬底部分的热应力要远低于有衬底支撑的部分,其余部分应力较均匀;随着温度的降低、MoS<sub>2</sub>厚度的减小以及衬底厚度的增加,MoS<sub>2</sub>的热应力均增大;在相同条件下,悬空 MoS<sub>2</sub>的热应力都低于衬底 MoS<sub>2</sub>的热应力。

## 参 考 文 献

- [1] Wang Q H, Kalantar-Zadeh K, Kis A, et al. Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides [J]. Nature Nanotechnology, 2012, 7 (11): 699-712.
- [2] Feng J J, Li X H, Zhu G Q, et al. Emerging high-performance SnS/CdS nanoflower heterojunction for ultrafast photonics[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2020, 12(38): 43098-43105.
- [3] Li X H, Feng J J, Mao W J, et al. Emerging uniform Cu<sub>2</sub>O nanocubes for 251st harmonic ultrashort pulse generation[J]. Journal of Materials Chemistry C, 2020, 8(41): 14386-14392.
- [4] Zhao Y, Wang W, Li X H, et al. Functional porous MOF-derived CuO octahedra for harmonic soliton molecule pulses generation[J]. ACS Photonics, 2020, 7(9): 2440-2447.
- [5] Zhang Y, Li X H, Qyyum A, et al. Saturable absorbers: PbS nanoparticles for ultrashort pulse generation in optical communication region[J]. Particle & Particle Systems Characterization, 2018, 35(11): 1870028.
- [6] Feng J J, Li X H, Shi Z J, et al. 2D ductile transition metal chalcogenides (TMCs): novel high-performance Ag<sub>2</sub>S nanosheets for ultrafast photonics [J]. Advanced Optical Materials, 2020, 8 (6) : 1901962.
- [7] Zhou X, Zhou N, Li C, et al. Vertical heterostructures based on SnSe<sub>2</sub>/MoS<sub>2</sub> for high performance photodetectors [J]. 2D Materials, 2017, 4(2): 025048.
- [8] Mak K F, Lee C, Hone J, et al. Atomically thin MoS<sub>2</sub>: a new direct-gap semiconductor[J]. Physical Review Letters, 2010, 105(13): 136805.
- [9] Kim K S, Kim K H, Nam Y, et al. Atomic layer etching mechanism of MoS<sub>2</sub> for nanodevices [J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2017, 9(13): 11967-11976.
- [10] Radisavljevic B, Radenovic A, Brivio J, et al. Single-layer MoS<sub>2</sub> transistors [J]. Nature Nanotechnology, 2011, 6(3): 147-150.

- [11] Lin M W, Liu L Z, Lan Q, et al. Mobility enhancement and highly efficient gating of monolayer MoS<sub>2</sub> transistors with polymer electrolyte [J]. *Journal of Physics D*, 2012, 45(34): 345102.
- [12] Zhong X Y, Zhou W C. High performance photovoltaic cells, phototransistors and self-powered photodetectors based on multilayered MoS<sub>2</sub>[EB/OL]. (2016-01-22) [2020-10-19]. <http://www.paper.edu.cn/releasepaper/content/201601-457>.  
钟旭英,周伟昌.高性能的多层二硫化钼光晶体管,光伏电池和自功率光探测器[EB/OL].(2016-01-22)[2020-10-19].<http://www.paper.edu.cn/releasepaper/content/201601-457>.
- [13] Zhang Y P, Zhang Y D, Ling N, et al. Finite element analysis based on the residual stress of thin film [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2005, 42(10): 23-26.  
张耀平,张云洞,凌宁,等.薄膜残余应力有限元分析研究[J].*激光与光电子学进展*, 2005, 42(10): 23-26.
- [14] Wang M G, Yang W F, Hu D D, et al. Patterned sapphire substrate technique: a review [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2012, 49(8): 080005.  
汪明刚,杨威风,胡冬冬,等.图形化蓝宝石衬底技术综述[J].*激光与光电子学进展*, 2012, 49(8): 080005.
- [15] Jiang Y, Luo Y, Xi G Y, et al. Effect of AlGaIn intermediate layer on residual stress control and surface morphology of GaN grown on 6H-SiC substrate by metal organic vapour phase epitaxy [J]. *Acta Physica Sinica*, 2009, 58(10): 7282-7287.  
江洋,罗毅,席光义,等.AlGaIn插入层对6H-SiC上金属有机物气相外延生长的GaN薄膜残余应力及表面形貌的影响[J].*物理学报*, 2009, 58(10): 7282-7287.
- [16] Liu X, Zhu J Q, Han J C. Thermal stresses in elastic multilayer systems [J]. *Mechanics in Engineering*, 2014, 36(4): 453-456.  
刘星,朱嘉琦,韩杰才.多层膜结构热应力计算[J].*力学与实践*, 2014, 36(4): 453-456.
- [17] Yuan Q H, Jing H Q, Zhong L, et al. Thermal stress in high-power semiconductor laser packaging [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2019, 46(10): 1001009.  
袁庆贺,井红旗,仲莉,等.大功率半导体激光器封装热应力研究[J].*中国激光*, 2019, 46(10): 1001009.
- [18] Sun J, Wu Y D, An J M, et al. Polymer thermo-optic switch with low-power consumption based on suspended waveguide [J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2020, 47(3): 0301008.  
孙健,吴远大,安俊明,等.基于悬浮波导的低功耗聚合物热光开关[J].*中国激光*, 2020, 47(3): 0301008.
- [19] Dong W, Zuo R, Lai X H, et al. Simulation of stresses in GaN thin film on sapphire [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2013, 50(7): 073101.  
董位,左然,赖晓慧,等.蓝宝石基GaN薄膜的热应力模拟分析[J].*激光与光电子学进展*, 2013, 50(7): 073101.
- [20] Yin J Y, Liu B, Zhang S, et al. Stress analysis of GaN materials grown on Si(111) substrates [J]. *Micronanoelectronic Technology*, 2008, 45(12): 703-705, 711.  
尹甲运,刘波,张森,等.Si(111)衬底上GaN外延材料的应力分析[J].*微纳电子技术*, 2008, 45(12): 703-705, 711.
- [21] Wu Y J, Zhou H. The effect of substrate material on strain field of MoS<sub>2</sub> [J]. *Journal of Jiangxi Normal University (Natural Science Edition)*, 2019, 43(4): 388-393.  
吴亚俊,周行.基底材料对MoS<sub>2</sub>的应变场影响[J].*江西师范大学学报(自然科学版)*, 2019, 43(4): 388-393.
- [22] Liu J, Shen H M, Zhu M H. Finite element analysis of MoS<sub>2</sub> coating under torsional fretting wear [J]. *Lubrication Engineering*, 2014, 39(3): 28-32, 37.  
刘娟,沈火明,朱旻昊.MoS<sub>2</sub>涂层扭动微动磨损特性有限元分析[J].*润滑与密封*, 2014, 39(3): 28-32, 37.
- [23] Guo X M, Zhu P. Calculation and simulation of thermal stress of multilayer films [J]. *Chinese Journal of Applied Mechanics*, 2020, 37(2): 743-749, 940.  
郭学敏,朱平.多层薄膜热应力模拟[J].*应用力学学报*, 2020, 37(2): 743-749, 940.
- [24] Wang X Z. Range analysis of thermal stress and displacement of GaN films on Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> substrate [J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2015, 52(4): 041602.  
王小增.Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>衬底上GaN薄膜热应力和变形极差分析[J].*激光与光电子学进展*, 2015, 52(4): 041602.
- [25] Liu S Y. Studies on the devices of suspended single-walled carbon nanotube and related properties [D]. Jinan: Shandong Normal University, 2018.

- 刘思雨. 悬空单壁碳纳米管器件的制备以及相关性能的研究[D]. 济南: 山东师范大学, 2018.
- [26] Chen K. Design and fabrication of Suspended-waveguide-based silicon thermo-optic devices [D]. Wuhan: Huazhong University of Science and Technology, 2019.
- 陈开. 基于悬空式光波导的硅基热光器件的设计与制作[D]. 武汉: 华中科技大学, 2019.
- [27] Yan R S, Simpson J R, Bertolazzi S, et al. Thermal conductivity of monolayer molybdenum disulfide obtained from temperature-dependent Raman spectroscopy[J]. ACS Nano, 2014, 8(1): 986-993.
- [28] Tian S B, Yang Y, Liu Z, et al. Temperature-dependent Raman investigation on suspended graphene: contribution from thermal expansion coefficient mismatch between graphene and substrate [J]. Carbon, 2016, 104: 27-32.
- [29] Baek S H, Choi Y, Choi W. Large-area growth of uniform single-layer MoS<sub>2</sub> thin films by chemical vapor deposition [J]. Nanoscale Research Letters, 2015, 10(1): 388.
- [30] Zhang H, Wu Y B. Electronic, thermal expanding, and optical absorption properties of transition metal dichalcogenides: a first-principles study [J]. Journal of Wuhan University of Technology (Materials Science), 2018, 33(6): 1355-1359.
- [31] Liu B. Thermal conductivity of MoS<sub>2</sub> thin films by molecular dynamic simulations[D]. Nanjing: Southeast University, 2015.
- 刘彪. 二硫化钼薄膜导热系数的分子动力学模拟[D]. 南京: 东南大学, 2015.
- [32] He J S. Preparation of nano-MoS<sub>2</sub> by hydrothermal method[D]. Xi'an: Xi'an University of Architecture and Technology, 2013.
- 何江山. 纳米二硫化钼水热合成制备研究[D]. 西安: 西安建筑科技大学, 2013.
- [33] Li M L, Wan Y L, Hu J Y, et al. Molecular dynamics simulation of effects of temperature and chirality on the mechanical properties of single-layer molybdenum disulfide[J]. Acta Physica Sinica, 2016, 65(17): 176201.
- 李明林, 万亚玲, 胡建玥, 等. 单层二硫化钼力学性能温度和手性效应的分子动力学模拟[J]. 物理学报, 2016, 65(17): 176201.
- [34] He Q, Zeng Z, Yin Z, et al. Fabrication of flexible MoS<sub>2</sub> thin-film transistor arrays for practical gas-sensing applications [J]. Small (Weinheim an Der Bergstrasse, Germany), 2012, 8(19): 2994-2999.