



## مطالعه خواص مکانیکی نانوصفحه تک لایه تنگستن دی سولفید

سینا ملک پور<sup>۱</sup>، رضا انصاری<sup>۲\*</sup>، منصور درویشه<sup>۳</sup>، مصطفی صادقی<sup>۴</sup>

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه گیلان، رشت

۲- دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه گیلان، رشت

۳- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه گیلان، رشت

۴- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه گیلان، رشت

\* گیلان، صندوق پستی ۴۱۶۳۵-۲۷۵۶، r\_ansari@guilan.ac.ir

## چکیده

## اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: ۱۱ بهمن ۱۳۹۲

پذیرش: ۱۹ بهمن ۱۳۹۲

ارائه در سایت: ۱۹ خرداد ۱۳۹۳

کلید واژگان:

تعیین خواص مکانیکی

تنگستن دی سولفید

نظریه تابعیت چگالی

از آنجایی که کالکژون‌های عناصر واسطه، نانومواد مقاوم برای تحمل کرنش‌های بزرگ بدون شکست هستند؛ کاربرد آن‌ها در نانو ابزارهای انعطاف‌پذیر الکترونیکی جدید بسیار مورد توجه است. تنگستن دی سولفید یکی از نانوساختارهای متعلق به این دسته از نانو مواد است که خواص الکتریکی، اپتیکی و سنسوری خاصی دارد و به علت داشتن ساختار غیر صفحه‌ای، پاسخ‌های جالبی تحت کرنش‌های صفحه‌ای مختلف از خود نشان می‌دهد. در این مقاله خواص مکانیکی نانوساختار تک‌لایه تنگستن دی سولفید مثل مدول یانگ، مدول بالک، مدول برشی و نسبت پواسون، با استفاده از نظریه تابعیت چگالی، و براساس تقریب گرادیان موضعی یا عمومی مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهند که مقدار خواص الاستیک نانوساختار تنگستن دی سولفید، کمتر از مقدار خواص نانوصفحات گرافن و برن‌نیتراید می‌باشد، اما نسبت پواسون آن از دو نانوصفحه گرافن و برن‌نیتراید بیشتر است. مشاهده می‌شود که به دلیل ساختار ویژه تنگستن دی سولفید، ضخامت این نانوصفحه (فاصله بین دو اتم گوگرد-گوگرد)، طول پیوند تنگستن-گوگرد و زاویه گوگرد-تنگستن-گوگرد تحت انواع کرنش‌های مختلف تغییر می‌کنند. همچنین، درحالت کرنش دومیحوره، میزان تغییرات سه پارامتر طول پیوندی، ضخامت و زاویه خمشی نسبت به حالت‌های کرنش تک‌محوره و برشی بیشتر است

Studying the mechanical properties of monolayer tungsten disulfide (WS<sub>2</sub>) nanosheets

SinaMalakpour, Reza Ansari\*, MansourDarvizeh, MostafaSadeghi

1- Department of Mechanical Engineering, University of Guilan, Rasht, Iran.

2- Department of Mechanical Engineering, University of Guilan, Rasht, Iran.

3- Department of Mechanical Engineering, University of Guilan, Rasht, Iran.

4- Department of Mechanical Engineering, University of Guilan, Rasht, Iran.

\*P.O.B. 3756-41635 Rasht, Iran, r\_ansari@guilan.ac.ir

## ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper  
Received 31January2014  
Accepted 08February2014  
Available Online 09 June 2014

## Keywords:

Determination of Mechanical Properties  
Tungsten Disulfide  
Density Functional Theory

## ABSTRACT

Forasmuch as, Transition Metal Dichalcogenides (TMDs) are robust nanomaterials to sustain large strains without fracture, their application in new pliable electronic nanodevices is so appealing. Of these nanomaterials is tungsten disulfide which has specific electrical, optical and sensor properties; and due to possessing a non-planar structure, shows interesting responses under different plane strains. This investigation explores the mechanical properties of a monolayer tungsten disulfide (WS<sub>2</sub>) such as Young's modulus, bulk modulus, shear modulus and Poisson's ratio by applying the Density Functional Theory (DFT) calculations based on the Generalized Gradient Approximation (GGA). The results demonstrate that elastic properties of WS<sub>2</sub> are less than those of graphene and its analogous inorganic Hexagonal Boron-Nitride (h-BN) nanosheets. Unlikely, Poisson's ratio is calculated higher than that of graphene and h-BN nanosheets. It is observed that, due to the special structure of WS<sub>2</sub>, the thickness of nanosheet (distance between S-S atoms), bond length of W-S and the angle S-W-S change under different kinds of strains. Also, in the case of biaxial strain, the amount of variations in bond length, thickness and bending angle is higher than that in the cases of uniaxial and shear strain.

## ۱- مقدمه

لازم برای برآورده کردن خواستگاه صنعت نانوالکترونیک آینده با ویژگی‌های انعطاف‌پذیری، تطابق و چندکاربرد بودن توجهات بسیاری را به سوی خود جلب نموده‌اند [۲]. میرنژاد و همکاران [۳-۵] در سال‌های اخیر مطالعات

بعد از اینکه گرافن در سال ۲۰۰۴ [۱] به صورت آزمایشگاهی مورد بررسی قرار گرفت، مواد دوبعدی، به دلیل برخورداری از خواص فیزیکی بی‌ظنیر و ظرفیت

## Please cite this article using:

S. Malakpour, R. Ansari, M. Darvizeh, M. Sadeghi, Studying the mechanical properties of monolayer tungsten disulfide (WS<sub>2</sub>) nanosheets, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 14, No. 5, pp. 11-14, 2014 (In Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

خواص مکانیکی الاستیک نانوساختار تک‌لایه  $WS_2$ ، مثل مدول یانگ، نسبت پواسون، مدول بالک و مدول برشی محاسبه می‌شوند.

### ۳-۱- مدولیانگ و نسبت پواسون

برای به‌دست آوردن مدولیانگ، ابتدا سلول واحد هگزاگونال سه اتمی مورد نظر که در شکل ۱ از نمای بالا نشان داده شده است، تحت کرنش یک‌طرفه و به‌صورت کششی و فشاری در بازه الاستیک و هارمونیک بین ۲٪ تا ۲٪ قرار می‌گیرد. با استفاده از فرمول (۱) مدولیانگ محاسبه می‌شود [۱۸]:

$$Y = \frac{1}{V_0} \frac{\partial^2 E_s}{\partial \varepsilon^2} \quad (1)$$

در فرمول (۱)  $V_0$  نشان دهنده حجم سلول واحد در حالت تعادلی و  $E_s$  هم انرژی کرنشی کل می‌باشد. نسبت پواسون هم به‌صورت نسبت کرنش عرضی به کرنش محوری تعریف می‌شود:

$$\nu = -\frac{\varepsilon_{trans}}{\varepsilon_{axial}} \quad (2)$$

مدول یانگ به‌دست آمده از این طریق برای  $WS_2$ ،  $454/0.9$  گیگاپاسکال می‌باشد که به‌ترتیب در حدود ۵۶٪ و ۴۵٪ کمتر از نانوصفحات گرافن و برن‌نیتراید و تقریباً ۲۲٪ بیشتر از  $MoS_2$  تک‌لایه است. اگر ضخامت را نادیده گرفته و به‌صورت صفحه‌ای با ساختار برخورد شود و مدول یانگ صفحه‌ای آن گزارش شود، مقدار  $142/7$  نیوتن بر متر به‌دست می‌آید که توافق خوبی با مرجع [۱۱] دارد. همچنین براساس فرمول (۲) نسبت پواسون، مقدار  $0/35$  به‌دست می‌آید که به مراتب بیشتر از نسبت پواسون دو ساختار هگزاگونال گرافن و برن‌نیتراید است.

### ۳-۲- مدولبالک و مدولبرشی

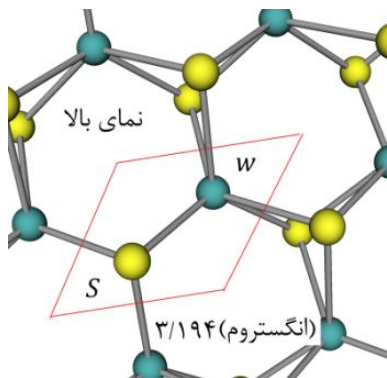
برای به‌دست آوردن مدولبالک، ساختار مورد نظر تحت کرنش دوطرفه به اندازه‌ی یکسان قرار داده می‌شود. بازه کرنش مورد نظر در اینجا هم بین ۲٪ تا ۲٪ است و با استفاده از فرمول (۳) این خاصیت مهم به‌دستی می‌آید [۱۹]:

$$B = V_0 \frac{\partial^2 E_s}{\partial V^2} \quad (3)$$

مدولبرشینانوساختار  $WS_2$  با ایجاد کرنش برشی در سلول واحد ساختار مورد نظر به‌دستی می‌آید. یعنی ساختار مورد نظر تحت کرنش برشی بین بازه ۰ تا  $0/105$  رادیان در صفحه‌ی  $xy$  قرار گرفته است و انرژی کرنشی کل محاسبه می‌شود. سپس با استفاده از فرمول (۴) مدولبرشی محاسبه می‌شود که در آن  $\gamma_{xy}$  میزان کرنش برشی صفحه‌ای می‌باشد [۲۰]:

$$S = \frac{1}{V_0} \frac{\partial^2 E_s}{\partial \gamma_{xy}^2} \quad (4)$$

با استفاده از فرمول‌های (۳) و (۴) مدول بالک و برشی، به‌ترتیب مقادیر  $242/73$  و  $223/0.5$  گیگاپاسکال به‌دست می‌آیند.



شکل ۱ نمای بالا از ساختار تنگستن دی سولفید و سلول واحد هگزاگونال

گسترده‌ای بر روی خواص مکانیکی نانوصفحات گرافن و برن‌نیترایدی تحت شرایط خارجی (جذب فیزیکی و تغییرات دما و افزایش تعداد لایه‌ها) با استفاده از روش DFT انجام داده‌اند. انصاری و همکاران [۶] نیز با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به بررسی خواص مکانیکی نانوصفحه گرافن تحت عیوب و نقص پرداختند. TMDهای متعدد، برخلاف گرافن، دارای مقدار باند گپ در بازه ۱ تا ۲ الکترون‌ولت هستند که این خاصیت، آن‌ها را برای کاربرد در نانوایز نوری- الکترونیکی و ترانزیستورها مورد توجه قرار داده است [۸،۷].  $WS_2$  و ساختار معروف  $MoS_2$  و همچنین ساختارهای دیگری مثل  $MoSe_2$ ،  $WSe_2$  جزء خانواده TMDها هستند. ونگ و همکاران [۹] در مورد خواص الکترونیکی و اپتیکی این خانواده مهم از ساختارها بررسی کرده‌اند و کاربردهای وسیع این ساختارها را در آینده نشان داده‌اند. قربانی اصل و همکاران [۱۰] نیز به بررسی خواص الکترومکانیکی تنگستن دی سولفید تک لایه و نانولوله تنگستن دی سولفید پرداختند و تاثیر کرنش را روی باند گپ آن‌ها بررسی کردند. خواص مکانیکی این نانوساختارها به‌خاطر کاربردهای فراوانی که در وسایل انعطاف‌پذیر دارند، بسیار حیاتی هستند. کانگ و همکاران [۱۱] با استفاده از نرم‌افزار وسپ<sup>۲</sup> به بررسی خواص فیزیکی و مکانیکی تعدادی از این TMDها پرداخته‌اند که مدول یانگ صفحه‌ای  $WS_2$  را  $139/54$  نیوتن بر متر گزارش کرده‌اند. همچنین به نانوساختار  $MoS_2$  به‌عنوان یکی از ساختارهای پرکاربرد، توجه زیادی شده است. کاستلانو-گومز و همکاران [۱۲]، سفتی نانوصفحه مولیبدنیم دی سولفید را در حدود  $330$  گیگاپاسکال محاسبه کرده‌اند. علاوه بر این، برتولازی و همکاران [۱۳] مدول یانگ این ساختار را در حدود  $270 \pm 10$  محاسبه کرده‌اند. در کنار تحقیقات محدود عددی و آزمایشگاهی، نیاز به مطالعات جامع‌تر و کامل‌تر بر روی خواص مکانیکی نانوساختار تنگستن دی سولفید دیده می‌شود. در این مقاله خواص مکانیکی تنگستن دی سولفید و تغییر شکل آن در مواجهه با انواع کرنش‌ها، با استفاده از محاسبات DFT و بر پایه تقریب گرادیان عمومی به- صورت کامل مورد بررسی قرار گرفته است.

### ۲- روش حل عددی

در این مقاله، از کد ورودی نرم‌افزار کوانتوم-اسپرسو<sup>۳</sup> [۱۴] برای انجام محاسبات نظریه تابعیت چگالی (DFT) در چارچوب تقریب گرادیان عمومی (GGA) و همبستگی تعادلی پی بی ای<sup>۴</sup> [۱۶،۱۵] استفاده شده است. در این محاسبات یک پکیج‌مانکهرست<sup>۵</sup> [۱۷] با مش‌های کا-پوینت  $20 \times 20 \times 1$ ، با انتگرال‌گیری در ناحیه بریلوین<sup>۶</sup> (سلول واحد اصلی در فضای معکوس) و انرژی کات-اف<sup>۷</sup> به مقدار  $80$  ری‌دبرگ برای بسط موج سطحی به‌کار گرفته شده است. همچنین در کار حاضر چون نتایج محاسبات نسبت به افزایش اندازه سلول واحد مورد نظر غیرحساس هستند، از کوچکترین سلول واحد ممکن برای انجام این بررسی استفاده شده است. این سلول واحد، یک سلول واحد هگزاگونال متشکل از سه اتم با ثابت‌های سلول واحد  $a=b=3/194$  و  $c=15$  انگستروم است.

### ۳- تعیین خواص مکانیکی

در اینجا با استفاده از مفهوم مشتق دوم انرژی‌های کرنشی از محاسبات DFT،

- 1- Transition Metal Dichalcogenides
- 2- VASP
- 3- Quantum Espresso
- 4- PBE
- 5- Monkhorst-Pack
- 6- Brillouin zone
- 7- Cut-off

جدول ۱ تغییر مولفه‌های ساختاری بر اثر کرنش تک‌محوره

کرنش تک محوره (%)	طول پیوند تنگستن-گوگرد (انگستروم)	فاصله‌ی دو اتم گوگرد (انگستروم)	زاویه (درجه)
-۲	۲/۴۱۶	۳/۱۶۵	۸۱/۸
۰	۲/۴۲۳	۳/۱۴۳	۸۰/۹
۲	۲/۴۳	۳/۱۲۱	۷۹/۹

جدول ۲ تغییر مولفه‌های ساختاری بر اثر کرنش دو محوره

کرنش دو محوره (%)	طول پیوند تنگستن-گوگرد (انگستروم)	فاصله‌ی دو اتم گوگرد (انگستروم)	زاویه (درجه)
-۲	۲/۴۱	۳/۱۹	۸۲/۹
۰	۲/۴۲۳	۳/۱۴۳	۸۰/۹
۲	۲/۴۳۷	۳/۱	۷۹

جدول ۳ تغییر مولفه‌های ساختاری بر اثر کرنش برشی

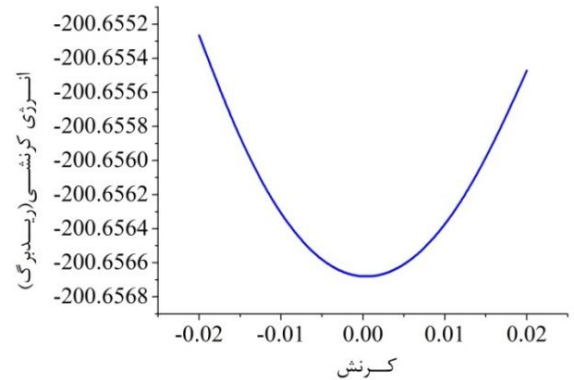
کرنش دو محوره (%)	طول پیوند تنگستن-گوگرد (انگستروم)	فاصله‌ی دو اتم گوگرد (انگستروم)	زاویه (درجه)
۰	۲/۴۲۳	۳/۱۴۳	۸۰/۹
۰/۰۰۵	۲/۴۲۵	۳/۱۴۴	۸۰/۸
۰/۰۱۱	۲/۴۲۸	۳/۱۴۵	۸۰/۷

#### ۴- تغییر شکل ساختار تنگستن دی سولفید

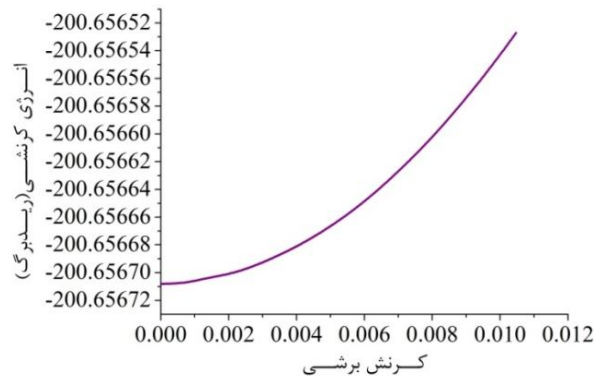
همان‌طور که در شکل ۴ ملاحظه می‌شود، ساختار صفحه  $WS_2$  دارای ضخامت در جهت Z بوده و در این شکل از نمای ایزومتریک این ساختار نشان داده شده است. شکل ۴ به خوبی نشان می‌دهد که هر اتم تنگستن با شش اتم گوگرد پیوند کووالانسی برقرار کرده است، که شکل ۵ به خوبی یک المان ۳ تایی از این ساختار را نشان می‌دهد. به صورت واضح مشخص است که اتم‌های گوگرد نسبت به نانوصفحه دارای خروج از صفحه‌گی هستند.

وقتی سلول واحد سه اتمی مورد نظر که در شکل ۵ مشخص است، تحت کرنش‌های خطی تک محوره، دو محوره و برشی قرار می‌گیرد، طول پیوندی و ضخامت و زاویه‌ای که در شکل ۵ دیده می‌شود تغییر می‌کند. این تغییرات در جداول ۱ و ۲ و ۳ برای سه نوع کرنش مختلف نشان داده شده است.

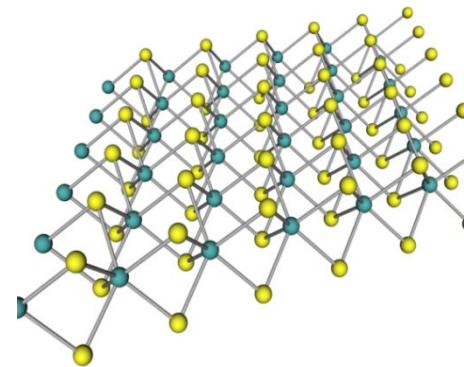
علت تغییرات پارامترهای موجود در جداول ۱ و ۲ و ۳، ماهیت ساختاری نانوصفحه تنگستن دی سولفید است که جزو ساختارهای کووالانسی با سلول واحد هگزگونال است. این نانوساختار همان‌طور که در شکل ۴ مشخص است، دارای مولفه (ضخامت) در جهت Z است و وقتی که نانوصفحه تحت کرنش تک-محوره و یا دو محوره قرار می‌گیرد، به علت کشش و فشارهایی که در ساختار ایجاد می‌شود پارامترهای طول پیوندی و ضخامت و زاویه تغییر می‌کنند. اگر این پارامترها تغییر نکنند ساختار تحت تاثیر کرنش دچار بهم ریختگی می‌شود و این تغییرات در پارامترهای نانوصفحه به نوعی پاسخ یک ساختار غیرالی با پیوندهای کووالانسی قوی به یک تغییر به نام کرنش است. بر اثر قرار گرفتن نانوصفحه تحت کرنش، زاویه دی هدرال<sup>۱</sup> و زاویه پیش‌شیغریویژه<sup>۲</sup> و زاویه خمشی<sup>۳</sup> زاویه خمشی<sup>۳</sup> تغییر می‌کنند که زاویه خمشی در نمای شکل ۵ موجود است. با تغییر زاویه خمشی و کوچک شدن آن، ساختار در جهت Z دچار جمع‌شدگی می‌شود و سپس طول باند نیز افزایش می‌یابد. به عبارت دیگر مقداری از انرژی



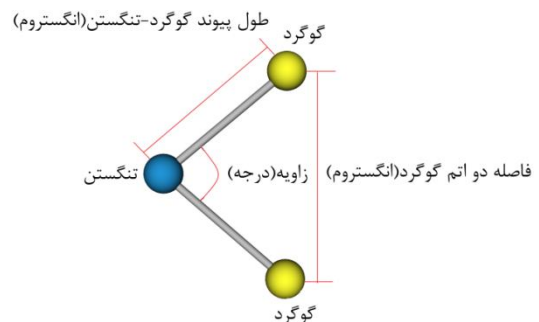
شکل ۲ تغییرات انرژی کرنشی ناشی از کرنش‌های خطی یک طرفه با کرنش خطی



شکل ۳ تغییرات انرژی کرنشی ناشی از کرنش‌های زاویه‌ای با کرنش برشی



شکل ۴ نمای ایزومتریک ساختار



شکل ۵ المان سه اتمی ساختار تنگستن دی سولفید

در شکل‌های ۲ و ۳ به ترتیب نمودارهای انرژی کرنشی برحسب کرنش خطی و زاویه‌ای نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل‌های ۲ و ۳ مشخص است نقطه بدون کرنش دارای مقدار مینیمم انرژی می‌باشد و علت آن این است که در این حالت، سیستم در حالت تعادلی خود قرار دارد و تحت هیچ کرنشی قرار نگرفته و طبیعتاً دارای کمترین مقدار انرژی است.

1- Dihedral Angle  
2- Improper torsion angle  
3- Bending angle

- [3] M. Mirnezhad, R. Ansari, M. Seifi, H. Rouhi, M. Faghinasiri, Mechanical properties of graphene under molecular hydrogen physisorption: an ab initio study, *Solid State Communications*, Vol. 152, No. 10, pp. 842-845, 2012.
- [4] M. Mirnezhad, M. Modarresi, R. Ansari, M. R. Roknabadi, Effect of temperature on young's modulus of graphene, *Journal of Thermal Stresses*, Vol. 35, No. 10, pp. 913-920, 2012.
- [5] M. Mirnezhad, R. Ansari, H. Rouhi, Mechanical properties of multilayer boron nitride with different stacking orders, *Superlattices and Microstructures*, Vol. 53, pp. 223-231, 2013.
- [6] R. Ansari, S. Ajori, B. Motevali, Mechanical properties of defective single-layered graphene sheets via molecular dynamics simulation, *Superlattices and Microstructures*, Vol. 51, No. 2, pp. 274-289, 2012.
- [7] J. Wilson, A. Yoffe, The transition metal dichalcogenides discussion and interpretation of the observed optical, electrical and structural properties, *Advanced Physics*, Vol. 18, No. 73, pp. 193-335, 1969.
- [8] B. Radisavljevic, A. Radenovic, J. Brivio, V. Giacometti, A. Kis, Single-layer MoS<sub>2</sub> transistors, *Nature Nanotechnology*, Vol. 6, No. 3, pp. 147-150, 2011.
- [9] Q. H. Wang, K. Kalantar-zadeh, A. Kis, J. N. Coleman, M. S. Strano, Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides, *Nature Nanotechnology*, Vol. 7, No. 11, pp. 699-712, 2012.
- [10] M. Ghorbani-Asl, N. Zibouche, M. Wahiduzzaman, A. F. Oliveira, A. Kuc, T. Heine, Electromechanics in MoS<sub>2</sub> and WS<sub>2</sub>: nanotube vs. monolayers, *arXiv:1308.1834v1 [cond-mat.mtrl-sci]*, 2013.
- [11] K. Jun, T. Sefaattin, Zh. Jian, L. Jingbo, W. Junqiao, Band offsets and heterostructures of two-dimensional semiconductors, *Applied Physics Letters*, Vol. 102, pp. 012111-012114, 2013.
- [12] A. Castellanos-Gomez, M. Poot, G. A. Steele, H. S. J. Van Der Zant, N. Agrait, G. Rubio-Bollinger, Elastic properties of freely suspended MoS<sub>2</sub> nanosheets, *Advanced Materials*, Vol. 24, No. 6, pp. 772-775, 2012.
- [13] S. Bertolazzi, J. Brivio, A. Kis, Stretching and breaking of ultrathin MoS<sub>2</sub>, *ACS Nano*, Vol. 5, No. 12, pp. 9703-9710, 2011.
- [14] S. Baroni, D. A. Corso, S. Gironcoli, P. Giannozzi, C. Cavazzoni, G. Ballabio, S. Scandolo, G. Chiarotti, P. Focher, A. Pasquarello, K. Laasonen, A. Trave, R. Car, N. Marzari, A. Kokalj, Quantum-espresso, <http://www.pwscf.org/>
- [15] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized gradient approximation made simple, *Physical Review Letters*, Vol. 77, No. 18, pp. 3865-3868, 1996.
- [16] J. P. Perdew, K. Burke, Y. Wang, Generalized gradient approximation for the exchange-correlation hole of a many-electron system, *Physical Review B*, Vol. 54, No. 23, pp. 16533-16539, 1996.
- [17] H. J. Monkhorst, J. D. Pack, On special points for brillouin zone integrations, *Physical Review B*, Vol. 13, No. 12, pp. 5188-5192, 1976.
- [18] P. Wagner, V. V. Ivanovskaya, M. J. Rayson, P. R. Briddon, C. P. Ewels, Mechanical properties of nanosheets and nanotubes investigated using a new geometry independent volume definition, *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 25, pp. 155302, 2013.
- [19] A. Nag, K. Raidongia, K. P. S. S. Hembram, R. Datta, U. V. C. N. R. Rao, Graphene analogue of BN: Novel synthesis and properties, *ACS Nano*, Vol. 4, pp. 1539, 2010.
- [20] K. Min, N. R. Aluru, Mechanical properties of graphene under shear deformation, *Applied Physics Letters*, Vol. 98, pp. 013113, 2011.

کرنش‌یاب‌گذاری صرف تغییرات زوایا و کاهش فاصله دو اتم گوگرد شده و مقداری هم طول باند را تغییر می‌دهد و خواص مکانیکی هم به‌گونه‌ای معرف این تغییرات انرژی کرنشی است. البته به‌طور دقیق نمی‌توان گفت که کدام یک از این تغییرات سه پارامتر زودتر صورت می‌گیرد و تغییر ساختار نانوصفحه تنگستن دی سولفید ترکیبی از تغییرات سه پارامتر زاویه و طول پیوندی و ضخامت است. درصد افزایش طول پیوندی تنگستن-گوگرد به-ازایبارگذاری هایتک‌محوره، دومحوره و برشیه‌ترتیب  $0.58\%$ ،  $1.12\%$  و  $0.21\%$  و درصد کاهش زاویه گوگرد-تنگستن-گوگرد به‌ازای این بارگذاری‌ها به-ترتیب  $2.32\%$ ،  $4.7\%$  و  $0.24\%$  و در صد کاهش فاصله دو اتم گوگرد-گوگرد (ضخامت) برای بارگذاری هایتک‌محوره و دومحوره به-ترتیب  $1.39\%$  و  $2.82\%$  است. با بررسی این درصد‌های افزایش و کاهش، پی به این موضوع برده می‌شود که درصد تغییرات ساختاری برای حالت کرنش دومحوره از حالت‌های کرنش تک‌محوره و برشی بیشتر است. علت این تأثیر بیشتر این است که در حالت کرنش دومحوره نانوصفحه تحت کرنش‌های یکسان در دو جهت است و تمام پیوندهای ساختار به جای یک سمت، از دو طرف تحت کرنش‌های کششی و فشاری هستند و نتیجتاً وقتی ساختار در دو جهت تحت کرنش قرار می‌گیرد، نسبت به حالت‌های یک طرفه و برشی دارای تغییرات بیشتر و روند تغییر سریع‌تر است. یکی از رهیافت‌های مهم این مقاله، تغییرات ضخامت تنگستن دی سولفید به‌ازای کرنش‌های مختلف خطی است. با در نظر گرفتن این ویژگی جالب ساختار WS<sub>2</sub> و ساختارهای هم‌خانواده آن مثل WS<sub>2</sub>، MoSe<sub>2</sub>، MoS<sub>2</sub> می‌توان از آن به‌عنوان نانوجک‌های مکانیکی در صنعت و همچنین نانوسنسورهای کرنشی استفاده کرد.

## ۵- جمع بندی

در این مقاله با استفاده از محاسبات DFT و بر پایه تقریب GGA-PBE، اقدام به یک تحقیق و بررسی پایه‌ای بر روی خواص مکانیکی نانوصفحه تک‌لایه WS<sub>2</sub> شده است. نتایج نشان می‌دهد که برخلاف نسبت پواسون، سایر خواص الاستیک به‌طور قابل ملاحظه‌ای از نانوصفحات‌گرافن و برن نیتراید کمتر است. همچنین در این بررسی مشخص شد که فاصله بین دو اتم گوگرد (ضخامت) نانوساختار به‌ازای کرنش‌های مختلف تغییر می‌کند که از این رهیافت می‌توان برای ساخت نانوبالابرهای مکانیکی و نانوسنسورهای کرنشی استفاده کرد.

## ۶- مراجع

- [1] 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*, Vol. 306, No. 5696, pp. 666-669, 2004.
- [2] C. Castro Neto, Novoselov K. S., Two-dimensional crystals: Beyond graphene, *Matter. Express*, Vol. 1, No. 1, pp. 10-17, 2011.