



مطالعه خواص مکانیکی نانوصفحه تک لایه تنگستن دی سولفید

سینا ملک پور^۱، رضا انصاری^{۲*}، منصور درویشه^۳، مصطفی صادقی^۴^۱- 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 ۴۱۶۳۵-۳۷۵۶، r_ansari@guilan.ac.ir

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

چکیده

از آنجایی که کالگوژن‌های 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 ینگ، 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، در حالت کرنش دوجوره، 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 (WS₂) 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 31 January 2014
Accepted 08 February 2014
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 (WS₂) 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 WS₂ 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 WS₂, 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 بی‌نظیر و ظرفیت

Please cite this article using:

S. Malakpour, R. Ansari, M. Darvizeh, M. Sadeghi, Studying the mechanical properties of monolayer tungsten disulfide (WS₂) 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 تک لایه WS_2 ، مثل مدول یانگ، نسبت پواسون، مدول بالک و مدول برشی محاسبه می شوند.

۳-۱- مدولیوانگ و نسبت پواسون

برای به دست آوردن مدولیوانگ، ابتدا سلول واحد هگزاگونال سه اتمی مورد نظر که در شکل ۱ از نمای بالا نشان داده شده است، تحت کرنش یک طرفه و به صورت کششی و فشاری در بازه الاستیک و هارمونیک بین ۲٪ تا ۲۰٪ قرار می گیرد. با استفاده از فرمول (۱) مدولیوانگ محاسبه می شود [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 می باشد. نسبت پواسون هم به صورت نسبت کرنش عرضی به کرنش محوری تعریف می شود:

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

مدول یانگ به دست آمده از این طریق برای WS_2 ، $454/0.9$ گیگاپاسکال می باشد که به ترتیب در حدود ۵۶٪ و ۴۵٪ کمتر از نانوصفحات گرافن و برنیتراید و تقریباً ۲۲٪ بیشتر از MoS_2 تک لایه است. اگر ضخامت را نادیده گرفته و به صورت صفحه ای با ساختار برخورد شود و مدول یانگ صفحه ای آن گزارش شود، مقدار $142/7$ نیوتن بر متر به دست می آید که توافق خوبی با مرجع [۱۱] دارد. همچنین براساس فرمول (۲) نسبت پواسون، مقدار $0/35$ به دست می آید که به مراتب بیشتر از نسبت پواسون دو ساختار هگزاگونال گرافن و برنیتراید است.

۳-۲- مدولبالک و مدولبرشی

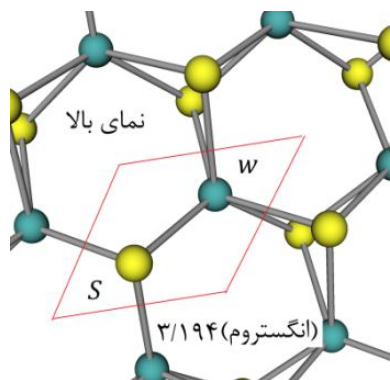
برای به دست آوردن مدولبالک، ساختار مورد نظر تحت کرنش دوطرفه به اندازه ی یکسان قرار داده می شود. بازه کرنش مورد نظر در اینجا هم بین ۲٪ تا ۲۰٪ است و با استفاده از فرمول (۳) این خاصیت مهم به دست می آید [۱۹]:

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

مدولبرشینانوساختار WS_2 با ایجاد کرنش برشی در سلول واحد ساختار مورد نظر به دست می آید. یعنی ساختار مورد نظر تحت کرنش برشی بین بازه ۰ تا $0/105$ رادیان در صفحه ی xy قرار گرفته است و انرژی کرنشی کل محاسبه می شود. سپس با استفاده از فرمول (۴) مدولبرشی محاسبه می شود که در آن γ_{xy} میزان کرنش برشی صفحه ای می باشد [۲۰]:

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

با استفاده از فرمول های (۳) و (۴) مدول بالک و برشی، به ترتیب مقادیر $242/73$ و $223/0.5$ گیگاپاسکال به دست می آیند.



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

گسترده ای بر روی خواص مکانیکی نانوصفحات گرافن و برنیترایدی تحت شرایط خارجی (جذب فیزیکی و تغییرات دما و افزایش تعداد لایه ها) با استفاده از روش DFT انجام داده اند. انصاری و همکاران [۶] نیز با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی به بررسی خواص مکانیکی نانوصفحه گرافن تحت عیوب و نقص پرداختند. TMD^۱ های متعدد، برخلاف گرافن، دارای مقدار باند گپ در بازه ۱ تا ۲ الکترون ولت هستند که این خاصیت، آن ها را برای کاربرد در نانوبازار 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 TMD ها هستند. ونگ و همکاران [۹] در مورد خواص الکترونیکی و اپتیکی این خانواده مهم از ساختارها بررسی کرده اند و کاربردهای وسیع این ساختارها را در آینده نشان داده اند. 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 آن ها بررسی کردند. خواص مکانیکی این نانوساختارها به خاطر کاربردهای فراوانی که در وسایل انعطاف پذیر دارند، بسیار حیاتی هستند. کانگ و همکاران [۱۱] با استفاده از نرم افزار و سپ^۲ به بررسی خواص فیزیکی و مکانیکی تعدادی از این TMD ها پرداخته اند که مدول یانگ صفحه ای WS_2 را $139/54$ نیوتن بر متر گزارش کرده اند. همچنین به نانوساختار MoS_2 به عنوان یکی از ساختارهای پرکاربرد، توجه زیادی شده است. کاستلانو-گومز و همکاران [۱۲]، سفتی نانوصفحه مولیبدنیم دی سولفید را در حدود 330 گیگاپاسکال محاسبه کرده اند. علاوه بر این، برتولازی و همکاران [۱۳] مدول یانگ این ساختار را در حدود 270 ± 10 محاسبه کرده اند. در کنار تحقیقات محدود عددی و آزمایشگاهی، نیاز به مطالعات جامع تر و کامل تر بر روی خواص مکانیکی نانوساختار تنگستن دی سولفید دیده می شود. در این مقاله خواص مکانیکی تنگستن دی سولفید و تغییر شکل آن در مواجهه با انواع کرنش ها، 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 نرم افزار کوانتوم-اسپرسو^۳ [۱۴] برای انجام محاسبات نظریه تابعیت چگالی (DFT) در چارچوب تقریب گرادیان عمومی (GGA) و همبستگی تعادلی پی بی ای^۴ [۱۶،۱۵] استفاده شده است. در این محاسبات یک پکیج مانکهرست^۵ [۱۷] با مش های $20 \times 20 \times 1$ کپوینت، با انتگرال گیری در ناحیه بریلوین^۶ (سلول واحد اصلی در فضای معکوس) و انرژی کات-اف^۷ به مقدار 80 ریدبرگ برای بسط موج سطحی به کار 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 ثابت های سلول واحد $a=b=3/194$ و $c=15$ انگستروم است.

۳- تعیین خواص مکانیکی

در اینجا با استفاده از مفهوم مشتق دوم انرژی های 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 (%)	تنگستن-گوگرد (انگستروم)	طول پیوند (انگستروم)	فاصله‌ی دو اتم (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 دوماحوره

کرنش دو محوره (%)	تنگستن-گوگرد (انگستروم)	طول پیوند (انگستروم)	فاصله‌ی دو اتم (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

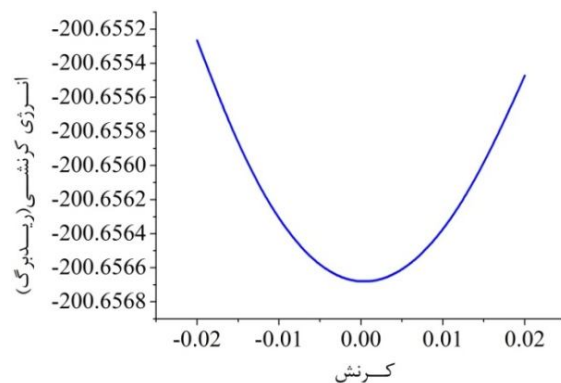
کرنش دو محوره (%)	تنگستن-گوگرد (انگستروم)	طول پیوند (انگستروم)	فاصله‌ی دو اتم (انگستروم)	زاویه (درجه)
۰	۲/۴۲۳	۳/۱۴۳	۸۰/۹	
۰/۰۰۵	۲/۴۲۵	۳/۱۴۴	۸۰/۸	
۰/۰۱۱	۲/۴۲۸	۳/۱۴۵	۸۰/۷	

۴- تغییر شکل ساختار تنگستن دی سولفید

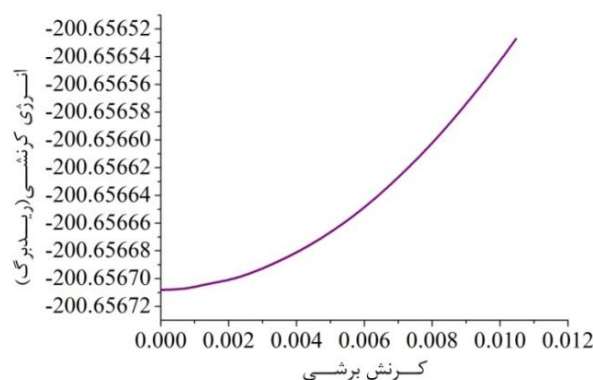
همان‌طور که در شکل ۴ ملاحظه می‌شود، ساختار صفحه WS_2 دارای ضخامت در جهت Z بوده و در این شکل از نمای ایزومتریک این ساختار نشان داده شده است. شکل ۴ به‌خوبی نشان می‌دهد که هر اتم تنگستن با شش اتم گوگرد پیوند کووالانسی برقرار کرده است، که شکل ۵ به‌خوبی یک المان ۳ تایی از این ساختار را نشان می‌دهد. به‌صورت 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.

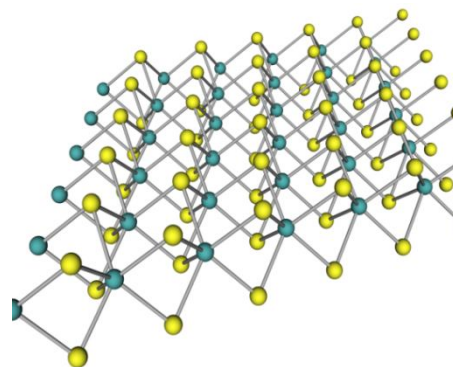
علت تغییرات پارامترهای موجود در جداول ۱ و ۲ و ۳، ماهیت ساختاری نانوصفحه تنگستن دی سولفید است که جزو ساختارهای کووالانسی با سلول واحد هگزاگونال است. این نانوساختار همان‌طور که در شکل ۴ مشخص است، دارای مولفه (ضخامت) در جهت Z است و وقتی که نانوصفحه تحت کرنش تک-محوره و یا دوماحوره قرار می‌گیرد، به‌علت کشش 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^۱ و زاویه پیچشی^۲ و زاویه خمشی^۳ زاویه خمشی^۳ 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



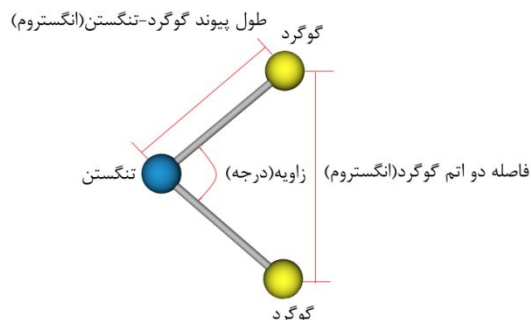
شکل ۲ تغییرات انرژی کرنشی ناشی از کرنش‌های خطی یک طرفه با کرنش خطی



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 به‌ترتیب 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. Faghihnasiri, 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 MoS₂ 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 MoS₂ and WS₂: 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 MoS₂ nanosheets, *Advanced Materials*, Vol. 24, No. 6, pp. 772-775, 2012.
- [13] S. Bertolazzi, J. Brivio, A. Kis, Stretching and breaking of ultrathin MoS₂, *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. 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.

کرنش یابارگذاری صرف تغییرات زوایا و کاهش فاصله دو اتم گوگرد شده و مقداری هم طول باند را تغییر می دهد و خواص مکانیکی هم به گونه ای معرف این تغییرات انرژی کرنشی است. البته به طور دقیق نمی توان گفت که کدام یک از این تغییرات سه پارامتر زودتر صورت می گیرد 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-از یابارگذاری هایتک محوره، دومحوره و برشی به ترتیب 0.58% ، 1.12% و 2.1% و درصد کاهش زاویه گوگرد-تنگستن-گوگرد به ازای این بارگذاری ها به-ترتیب 2.32% ، 4.7% و 24.0% و در صد کاهش فاصله دو اتم گوگرد-گوگرد (ضخامت) برای بارگذاری هایتک محوره و دومحوره به ترتیب 1.39% و 2.82% است. با بررسی این درصد های افزایش و کاهش، پی به این موضوع برده می شود که درصد تغییرات ساختاری برای حالت کرنش دومحوره از حالت های کرنش تک محوره و برشی بیشتر است. علت این تأثیر بیشتر این است که در حالت کرنش دومحوره نانوصفحه تحت کرنش های یکسان در دو جهت است و تمام پیوندهای ساختار به جای یک سمت، از دو طرف تحت کرنش های کششی و فشاری هستند و نتیجتاً وقتی ساختار در دو جهت تحت کرنش قرار می گیرد، نسبت به حالت های یک طرفه و برشی دارای تغییرات بیشتر و روند تغییر سریع تر است. یکی از رهیافت های مهم این مقاله، تغییرات ضخامت تنگستن دی سولفید به ازای کرنش های مختلف خطی است. با در نظر گرفتن این ویژگی جالب ساختار WS₂ و ساختارهای هم خانواده آن مثل WS₂، MoSe₂، MoS₂ می توان از آن به عنوان نانوجک های 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 پایه ای بر روی خواص مکانیکی نانوصفحه تک لایه WS₂ شده است. نتایج نشان می دهد که برخلاف نسبت پواسون، سایر خواص الاستیک به طور قابل ملاحظه ای از نانوصفحات گرافن و برن نیتراید کمتر است. همچنین در این بررسی مشخص شد که فاصله بین دو اتم گوگرد (ضخامت) نانوساختار به ازای کرنش های مختلف تغییر می کند که از این رهیافت می توان 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.