Material Sciences 材料科学, 2026, 16(11), 7-13
Published Online November 2026 in Hans. https://www.hanspub.org/journal/ms
https://doi.org/10.12677/ms.2026.1611205

Hans汉斯

TRIG-yne力学各向异性与应力调控研究

符继耀*，姜　山*，李　晶，邱东超#

辽宁科技大学理学院，辽宁　鞍山

收稿日期：2026年9月29日；录用日期：2026年10月28日；发布日期：2026年11月6日

摘　要

本文采用第一性原理方法，研究了二维碳材料TRIG-yne的结构稳定性、力学各向异性及应力调控下的电子结构。结果表明，TRIG-yne的声子谱无虚频，内聚能与典型二维碳材料相近，结构稳定，其杨氏模量和泊松比表现出显著的各向异性。本征TRIG-yne为间接带隙半导体，费米能级附近的电子态主要由p轨道电子贡献。沿不同方向施加应力后，带隙变化趋势明显不同：x方向压缩使带隙减小、拉伸使带隙增大；y方向压缩对带隙影响较小，拉伸则使带隙闭合，体系转变为金属。相同大小的应力在不同方向上引起的电子结构变化明显不同，表明TRIG-yne的力学各向异性与电子特性之间存在显著耦合，其电子结构可通过应力方向和应力类型进行有效调控，为发展新型方向敏感电子器件提供了理论依据。

关键词

TRIG-yne，第一性原理，力学各向异性，应力调控

Study on the Mechanical Anisotropy and Stress Tuning of TRIG-yne

Jiyao Fu*, Shan Jiang*, Jing Li, Dongchao Qiu#

School of Science, University of Science and Technology Liaoning, Anshan Liaoning

Received: September 29, 2026; accepted: October 28, 2026; published: November 6, 2026

Abstract

In this work, the structural stability, mechanical anisotropy, and stress-tuned electronic structures of a two-dimensional carbon material, TRIG-yne, were investigated by first-principles calculations. The results show that TRIG-yne has no imaginary frequencies in its phonon spectrum and a cohesive

*共同第一作者。
#通讯作者。

文章引用: 符继耀, 姜山, 李晶, 邱东超. TRIG-yne 力学各向异性与应力调控研究[J]. 材料科学, 2026, 16(11): 7-13.
DOI: 10.12677/ms.2026.1611205

energy comparable to those of typical two-dimensional carbon materials, indicating a stable structure, and its Young's modulus and Poisson's ratio exhibit pronounced anisotropy. Pristine TRIG-yne is an indirect bandgap semiconductor, and the electronic states near the Fermi level are mainly contributed by p orbitals. Under stresses applied along different directions, the bandgap variation shows distinctly different trends: compression along the x direction reduces the bandgap, while tension along the x direction enlarges it; compression along the y direction has little effect on the bandgap, whereas tension along the y direction closes the bandgap and drives the system into a metallic state. The significant differences in the electronic structure changes induced by the same magnitude of stress along different directions indicate a strong coupling between the mechanical anisotropy and electronic properties of TRIG-yne. These results suggest that the electronic structures of TRIG-yne can be effectively tuned by the stress direction and type, providing a theoretical basis for the development of novel direction-sensitive electronic devices.

Keywords

TRIG-yne, First-Principles, Mechanical Anisotropy, Stress Tuning

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.
This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).
http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Open Access

1. 引言

二维材料的研究热潮始于 2004 年石墨烯的成功剥离[1]。这一突破不仅证实了二维材料可稳定存在，更揭示了其区别于体相材料的独特物理规律。石墨烯所展现的狄拉克锥电子结构、超高载流子迁移率和优异力学强度[2]-[4]，激发了学界对低维物理体系的广泛探索。凭借低维结构赋予的独特电子、力学、光学及化学特性，二维材料迅速成为材料科学、凝聚态物理与能源科学等交叉领域的研究热点，并在力学、电学、光学、传感及能源存储等方面展现出广阔应用前景。

二维材料虽展现出丰富的物理性质和应用潜力，但其物性往往由固有晶格结构决定，难以通过外部手段灵活调节。例如，石墨烯虽然具有极高的载流子迁移率，但本征带隙为零，限制了其在逻辑器件中的应用；过渡金属硫化物虽具有天然带隙，但其载流子类型和迁移率难以连续调控。因此，如何在保持结构稳定的前提下实现对二维材料物性的有效调节，已成为其器件应用中的关键问题。寻求一种不改变材料化学组成、又能连续调控其电子与光学性质的外部手段，对于拓展二维材料的应用范围具有重要意义。

应变工程是调控二维材料物性的重要手段。通过施加应变，可有效改变二维材料的晶格对称性与电子轨道重叠程度，进而调控其能带结构、载流子迁移率及光学性质。例如，ReS_2 具有强烈的层内光学各向异性和电子耦合作用，这使其在构建偏振敏感的光电探测器方面表现出独特优势[5]。此外，黑磷、砷烯等本征各向异性材料在外应力下表现出显著的方向依赖响应，为方向敏感器件设计提供了可能[6] [7]。然而，这类材料的各向异性主要来自其固有晶格，可调空间有限，难以满足方向敏感器件对可调响应的需求。

因此，揭示力学各向异性与电子特性之间的耦合机制，并建立应力方向–电子态响应的定量关系，是值得进一步研究的问题。TRIG-yne 是一种通过第一性原理计算设计的新型二维碳材料，其结构综合了 T-graphene 和 R-graphyne 两种结构单元的特征[8]。基于此，本文采用第一性原理方法系统研究了其结构稳定性、力学各向异性及应力调控下的电子结构，以期为新型方向敏感电子器件的设计提供理论参考。

2. 计算方法

本文基于密度泛函理论，利用 VASP 软件包[9]，采用投影缀加波(PAW)方法进行计算[10]，交换关联泛函采用广义梯度近似(GGA)和 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE)势[11] [12]。为获取材料的准确带隙信息，能带计算采用 Heyd-Scuseria-Eenzerhof (HSE 06)杂化泛函[13]。经收敛测试，平面波截断能设置为 900 eV，布里渊区积分采用 Monkhorst-Pack 方法，K 点网格设置为 4 × 7 × 1。原子能量和力的收敛标准分别设定为 10^{-7} eV和 10^{-2} eV/Å，以确保每个原子的焓值能够精确收敛至小于 1 meV。

3. 结果与讨论

3.1. 结构与稳定性

TRIG-yne 是一种由碳原子构成的周期性网状结构，属正交晶系，空间群为 Pmmm (No. 47)，原胞含 6 个碳原子，晶格常数 a = 6.024 Å、b = 3.456 Å。优化后的 2 × 2 × 1 超胞结构如图 1(a)所示，其中三种不等价碳原子分别标记为 C_1、C_2 和 C_3。四元环内 C_1-C_2 为单键，键长 1.471 Å；十二元环中 C_2-C_3、C_1-C_1 和 C_3-C_3 均为双键，键长分别为 1.349 Å、1.373 Å 和 1.247 Å。

为验证 TRIG-yne 的动力学稳定性，计算了其声子谱，如图 1(b)所示。声子谱用于表征晶格振动模式，若整个布里渊区内声子频率均为正值，说明结构动力学稳定；若出现虚频，则说明该结构不稳定。计算结果表明，TRIG-yne 在整个布里渊区内无虚频，表明其动力学稳定。

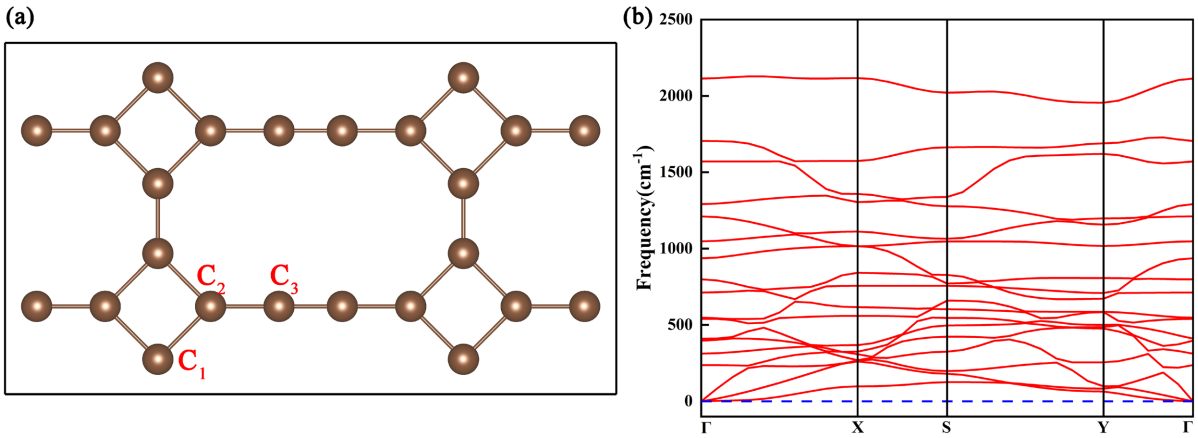


Figure 1. (a) Optimized supercell structure of TRIG-yne; (b) Phonon dispersion curves of TRIG-yne
图 1. (a) 优化后的 TRIG-yne 超胞结构；(b) TRIG-yne 的声子色散曲线

进一步通过内聚能考察其能量稳定性，公式为：

$$E_{coh} = \frac{E_{TR} - nE_C}{n} \quad (1)$$

其中 E_{TR} 是 TRIG-yne 的总能量，变量 n 表示超晶胞中 C 原子的数量，E_C 表示单个孤立 C 原子的能量[14]。计算得到 TRIG-yne 的内聚能为−7.23 eV/atom，与石墨烯、石墨炔等二维碳材料相近[14]，说明其结构稳定。

3.2. 力学性能

为评估单层 TRIG-yne 的力学性能，计算了其弹性常数：C_{11} = 173.65 GPa，C_{12} = C_{21} = 14.44 GPa，

$C_{22}=86.39$ GPa，$C_{66}=4.79$ GPa。这些数值满足 Born 力学稳定性准则[15]，即 $C_{11}C_{22}-C_{12}>0$ 和 $C_{66}>0$，表明 TRIG-yne 具有良好的力学稳定性。基于弹性常数，杨氏模量 $Y(\theta)$ 和泊松比 $v(\theta)$ 可由下式计算，其中 θ 为从 x 轴逆时针测量的角度[16]：

$$v(\theta)=\frac{C_{12}\cos^4\theta-B\cos^2\theta\sin^2\theta+C_{12}\sin^4\theta}{C_{22}\cos^4\theta+A\cos^2\theta\sin^2\theta+C_{11}\sin^4\theta} \tag{2}$$

$$Y(\theta)=\frac{C_{11}C_{22}-C_{12}^2}{C_{22}\cos^4\theta+A\cos^2\theta\sin^2\theta+C_{11}\sin^4\theta} \tag{3}$$

其中，$A=\left(C_{11}C_{22}-C_{12}^2\right)/C_{66}-2C_{12}$，$B=C_{11}+C_{22}-\left(C_{11}C_{22}-C_{12}^2\right)/C_{66}$

图 2(a)和图 2(b)分别以极坐标形式给出了单层 TRIG-yne 杨氏模量和泊松比随晶体取向(0°~360°)的变化。杨氏模量在 0°和 180°方向最大，约为 171.24 GPa；在 90°和 270°方向为 85.19 GPa。在 46°、134°、226°和 314°方向降至最低，约为 17.81 Gpa。泊松比则呈现类似的方向依赖特征，其值在 0.08 (90°方向)至 0.8 (39°方向)之间变化。这表明 TRIG-yne 的面内力学性能具有显著各向异性，其根源在于不同晶向上原子密度、排列方式和化学键类型的差异。这种力学性能的方向依赖性，为需要差异化强度与柔韧性的方向敏感器件设计提供了理论依据。

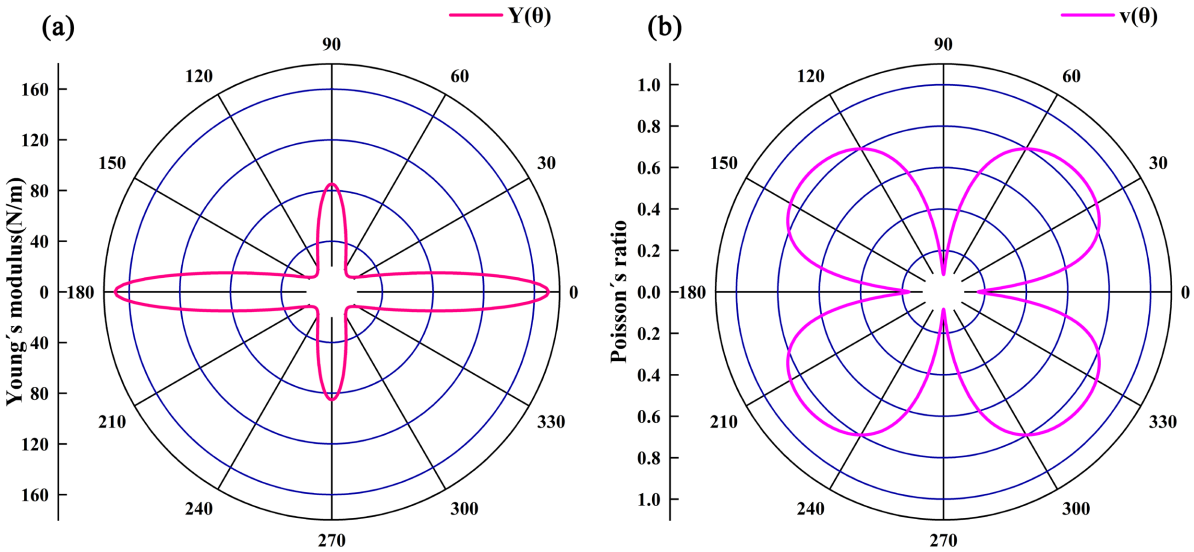


Figure 2. (a) Young's modulus of TRIG-yne; (b) Poisson's ratio of TRIG-yne
图 2. (a) TRIG-yne 的杨氏模量；(b) TRIG-yne 的泊松比

3.3. 能带结构

采用 HSE06 方法计算了 TRIG-yne 的能带结构和投影态密度(PDOS)，如图 3 所示。图 3(a)为−3 eV 至 3 eV 范围内的能带，TRIG-yne 本征态呈现间接带隙半导体特征，带隙值为 0.067 eV。由图 3(b)的 PDOS 可见，费米能级附近的电子态主要来自 p 轨道电子贡献，说明该能量区间的电子态主要源于 p 轨道电子的杂化与成键作用；s 轨道电子贡献较弱，主要分布在−3 eV 至−2 eV 的深能级区域及 2 eV 至 3 eV 的未占据态区域，且其态密度明显低于费米能级附近的 p 轨道电子态。总体而言，PDOS 分析与能带结构结果一致，进一步表明 TRIG-yne 的电子结构主要由碳原子的 p 轨道电子主导，s 轨道电子对费米能级附近电子态的贡献可以忽略。

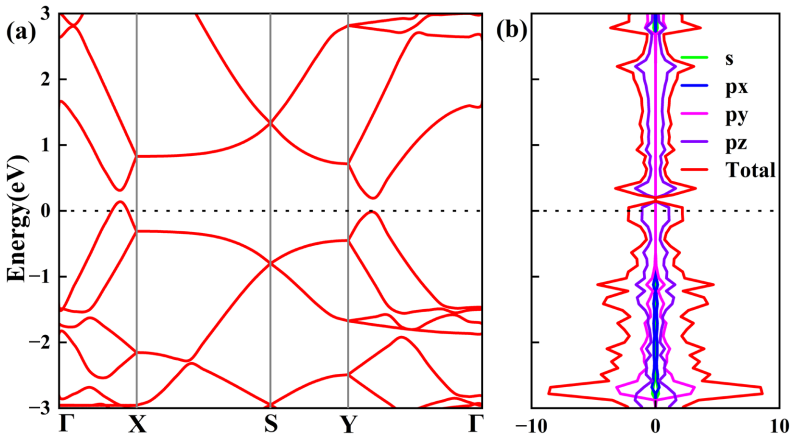


Figure 3. (a) Band structure and (b) projected density of states (PDOS) of the electronic orbitals for TRIG-yne
图 3. TRIG-yne 的(a)能带结构和(b)电子轨道的投影态密度(PDOS)图

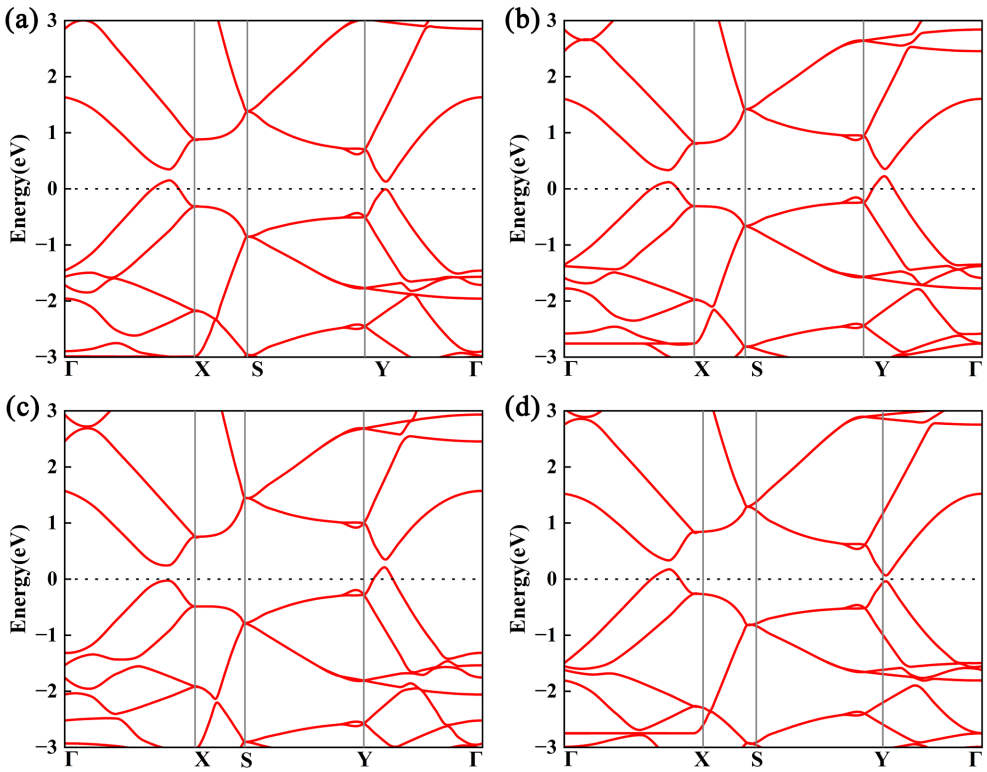


Figure 4. (a) Compressive stress of 4 GPa along the x-axis; (b) tensile stress of 4 GPa along the x-axis; (c) compressive stress of 4 GPa along the y-axis; (d) tensile stress of 4 GPa along the y-axis
图 4. (a) 沿 x 轴施加压缩应力 4 GPa；(b) 沿 x 轴施加拉伸应力 4 GPa；(c) 沿 y 轴施加压缩应力 4 GPa；(d) 沿 y 轴施加拉伸应力 4 GPa

为研究应力对 TRIG-yne 电子结构的调控作用，沿 x 和 y 方向分别施加 4 GPa 应力，并考虑压缩和拉伸两种情况，计算所得能带结构如图 4 所示。图 4(a)~(d)分别对应 x 轴压缩、x 轴拉伸、y 轴压缩和 y 轴拉伸四种情况。未施加应力时，TRIG-yne 为间接带隙半导体，带隙为 0.067 eV。施加应力后，其能带结构发生显著变化，且变化趋势与应力方向密切相关。这一差异表明，不同方向的应力对晶格的作用并不

相同。为从微观层面理解上述带隙变化，进一步分析了不同方向应力下四元环和十二元环内 C-C 键的键长变化，结果见表 1。由表 1 可见，不同应力条件下各 C-C 键的键长发生了不同程度的变化。键长的改变直接影响碳原子的轨道重叠程度，进而改变能带结构。沿 x 方向施加应力时，压缩使带隙由 0.067 eV 降至 0.0041 eV，降幅约 94%，能带在费米能级附近明显靠近，体系接近金属态；拉伸则使带隙增至 0.1447 eV，较本征态增大约 116%，半导体特征增强，可见 x 方向应力对带隙具有显著调控作用，且压缩与拉伸的效果相反。沿 y 方向施加应力时，压缩使带隙略微增至 0.0784 eV，变化幅度较小，体系仍保持半导体特征；拉伸则使带隙完全闭合至 0 eV，能带穿越费米能级，体系由半导体转变为金属，表明 y 方向拉伸应力可诱导 TRIG-yne 发生半导体–金属相变。对比四个结果可以发现，相同大小的应力沿不同方向施加时，带隙的变化趋势和幅度存在明显差异：x 方向压缩使带隙大幅减小，x 方向拉伸使带隙增大；y 方向压缩对带隙影响较小，y 方向拉伸则使带隙完全闭合。这种方向依赖的响应表明，TRIG-yne 的力学各向异性与电子特性之间存在显著耦合，其电子结构可通过应力方向和应力类型进行有效调控，为发展新型应变敏感电子器件提供了理论依据。

Table 1. Bond length variations of C-C bonds in TRIG-yne under stresses along different directions
表 1. 不同方向和类型应力下 TRIG-yne 的 C-C 键长

应力条件	C_1-C_2 (Å)	C_2-C_3 (Å)	C_1-C_1 (Å)	C_3-C_3 (Å)
无应力	1.471	1.349	1.373	1.247
x 轴压缩 4 GPa	1.454	1.326	1.376	1.225
x 轴拉伸 4 GPa	1.486	1.386	1.379	1.263
y 轴压缩 4 GPa	1.443	1.351	1.329	1.243
y 轴拉伸 4 GPa	1.501	1.354	1.437	1.245

4. 结论

本文采用第一性原理方法，系统研究了二维碳材料 TRIG-yne 的结构稳定性、力学各向异性及应力调控下的电子结构，主要结论如下：

(1) TRIG-yne 为正交晶系结构，空间群为 Pmmm (No. 47)，原胞含 6 个碳原子。声子谱无虚频，内聚能与典型二维碳材料相近，表明其结构稳定。

(2) TRIG-yne 的力学性质具有显著各向异性。杨氏模量在 0˚和 180˚方向最大，约为 171.24 GPa，在 46˚、134˚、226˚和 314˚方向降至最低，约为 17.81 GPa；泊松比在 0.08 至 0.8 之间变化，其方向依赖性与杨氏模量一致。

(3) 本征 TRIG-yne 为间接带隙半导体，带隙为 0.067 eV，费米能级附近的电子态主要由 p 轨道电子贡献，s 轨道电子贡献较弱。

(4) 沿 x 和 y 方向施加 4 GPa 应力后，带隙变化与应力方向密切相关。x 方向压缩使带隙降至 0.0041 eV，拉伸使带隙增至 0.1447 eV；y 方向压缩使带隙略微增至 0.0784 eV，拉伸则使带隙完全闭合，体系转变为金属。相同大小的应力在不同方向上引起的电子结构变化明显不同，表明 TRIG-yne 的力学各向异性与电子特性之间存在显著耦合。

上述结果表明，TRIG-yne 的电子结构可通过应力方向和应力类型进行有效调控，为发展新型方向敏感电子器件提供了理论依据。

基金项目

本文系 2025 年辽宁科技大学研究生科技创新项目“基于力学各向异性与电子特性耦合的新型二维材料 TRIG-yne 的设计与调控研究”(项目负责人：符继耀，项目编号：LKDYC202527)研究成果；2025 年辽宁科技大学大学生创新创业训练计划项目“放射性元素在金刚石表面吸附的第一性原理研究”(项目负责人：姜山)经费资助。

参考文献

[1] Novoselov, K.S., Geim, A.K., Morozov, S.V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S.V., *et al*. (2004) Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, **306**, 666-669. https://doi.org/10.1126/science.1102896

[2] Novoselov, K.S., Geim, A.K., Morozov, S.V., Jiang, D., Katsnelson, M.I., Grigorieva, I.V., *et al*. (2005) Two-Dimensional Gas of Massless Dirac Fermions in Graphene. *Nature*, **438**, 197-200. https://doi.org/10.1038/nature04233

[3] Cao, T., Liu, X., Cheng, X., Li, Y., Sang, L., Ma, J., *et al*. (2019) Unveiling the Thickness-Dependent Mechanical Properties of Graphene Papers by *in Situ* SEM Tension. *RSC Advances*, **9**, 4609-4615. https://doi.org/10.1039/c8ra09818b

[4] Kong, W., Wang, R., Xiao, X., Zhan, F., Gan, L., Wei, J., *et al*. (2021) Dirac Fermions in Graphene with Stacking Fault Induced Periodic Line Defects. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, **12**, 10874-10879. https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.1c02996

[5] Liu, E., Fu, Y., Wang, Y., Feng, Y., Liu, H., Wan, X., *et al*. (2015) Integrated Digital Inverters Based on Two-Dimensional Anisotropic ReS_2 Field-Effect Transistors. *Nature Communications*, **6**, Article No. 6991. https://doi.org/10.1038/ncomms7991

[6] Tao, J., Shen, W., Wu, S., Liu, L., Feng, Z., Wang, C., *et al*. (2015) Mechanical and Electrical Anisotropy of Few-Layer Black Phosphorus. *ACS Nano*, **9**, 11362-11370. https://doi.org/10.1021/acsnano.5b05151

[7] Liu, H., Neal, A.T., Zhu, Z., Luo, Z., Xu, X., Tománek, D., *et al*. (2014) Phosphorene: An Unexplored 2D Semiconductor with a High Hole Mobility. *ACS Nano*, **8**, 4033-4041. https://doi.org/10.1021/nn501226z

[8] Fu, J., Li, J. and Qiu, D. (2026) Structural Design and Property Exploration of Two-Dimensional Anisotropic Carbon Material TRIG-Yne. *Physica B*: *Condensed Matter*, **736**, Article ID: 418704. https://doi.org/10.1016/j.physb.2026.418704

[9] Hafner, J. (2008) *Ab-Initio* Simulations of Materials Using VASP: Density-Functional Theory and Beyond. *Journal of Computational Chemistry*, **29**, 2044-2078. https://doi.org/10.1002/jcc.21057

[10] Blöchl, P.E. (1994) Projector Augmented-Wave Method. *Physical Review B*, **50**, 17953-17979. https://doi.org/10.1103/physrevb.50.17953

[11] Grimme, S. (2006) Semiempirical GGA-Type Density Functional Constructed with a Long-Range Dispersion Correction. *Journal of Computational Chemistry*, **27**, 1787-1799. https://doi.org/10.1002/jcc.20495

[12] Ernzerhof, M. and Scuseria, G.E. (1999) Assessment of the Perdew-Burke-Ernzerhof Exchange-Correlation Functional. *The Journal of Chemical Physics*, **110**, 5029-5036. https://doi.org/10.1063/1.478401

[13] Krukau, A.V., Vydrov, O.A., Izmaylov, A.F. and Scuseria, G.E. (2006) Influence of the Exchange Screening Parameter on the Performance of Screened Hybrid Functionals. *The Journal of Chemical Physics*, **125**, Article ID: 224106. https://doi.org/10.1063/1.2404663

[14] Majidi, R. (2017) Density Functional Theory Study on Structural and Mechanical Properties of Graphene, T-Graphene, and R-Graphyne. *Theoretical Chemistry Accounts*, **136**, Article No. 109. https://doi.org/10.1007/s00214-017-2148-1

[15] Mouhat, F. and Coudert, F. (2014) Necessary and Sufficient Elastic Stability Conditions in Various Crystal Systems. *Physical Review B*, **90**, Article ID: 224104. https://doi.org/10.1103/physrevb.90.224104

[16] Wang, M., Xie, Y., Sun, S. and Ye, X. (2024) SiP_2 Monolayer as Potential Anode Material for Na/K-Ion Batteries Predicted from First-Principles Calculations. *Surfaces and Interfaces*, **54**, Article ID: 105264. https://doi.org/10.1016/j.surfin.2024.105264