

磷烯纳米管的热稳定性与力学特性

李婷[†] 孔婧文 杨佳云 黄滢竹 肖哲

(辽宁师范大学物理与电子技术学院, 大连 116029)

(2026 年 1 月 23 日收到; 2026 年 2 月 17 日收到修改稿)

采用分子动力学方法系统研究了扶手椅型和锯齿型磷烯纳米管的热稳定性与力学特性. 热稳定性研究表明, 两类纳米管在室温以上均可稳定存在, 临界温度分别为 390 K(扶手椅型) 和 320 K(锯齿型), 扶手椅型磷烯纳米管具有更好的稳定性. 力学分析表明, 两种手型纳米管的拉伸与压缩模量均呈现显著各向异性, 并与二维磷烯相应取向的弹性特性基本一致. 温度升高显著降低磷烯纳米管的拉伸性能, 从 50 K 升至 300 K, 两类纳米管的断裂强度下降约 50%, 断裂应变下降 55%—60%. 相比之下, 磷烯纳米管的压缩性能受温度影响程度较弱, 但锯齿型纳米管的屈曲性能在 300 K(接近其热稳定极限) 时急剧下降, 此时两类纳米管的失效机制不同: 扶手椅型是由局部屈曲主导的结构失稳, 锯齿型则是以局部压溃主导的材料失效. 相较未卷曲的二维磷烯, 几何曲率引起的预应变效应削弱了磷烯纳米管的轴向抗拉伸能力, 同时其屈曲应变也普遍降低, 但屈曲强度因环向约束的“加固”效应反而增大.

关键词: 磷烯纳米管, 热稳定性, 力学特性, 分子动力学**DOI:** 10.7498/aps.75.20260124**CSTR:** 32037.14.aps.75.20260124

1 引言

自 2004 年石墨烯被发现以来, 二维材料因众多优异的性能和多学科领域的应用前景引起了研究者的极大兴趣^[1-5]. 这些具有不同原子种类、晶体结构以及物理特性的二维材料可以作为丰富的材料库, 超越传统晶格匹配与加工兼容性的限制, 灵活构建异质体系, 发挥材料的协同作用与功能耦合^[6-10]. 类似石墨烯和碳纳米管的关系, 将二维材料沿不同手性方向卷曲可以得到相对应的一维结构. 纳米管具有高度约束的径向尺寸和大的长径比, 更低的材料维度与弯曲表面使其不仅继承了二维材料中的量子限域效应, 同时可能具备新的特性优势与技术应用, 特别是在高性能电子、光电子及能源存储器件等领域^[11-17]. 但是相较被广泛研究的二维材料, 目前实验可以制备的纳米管种类非常有限, 如碳纳米管、氮化硼纳米管、过渡金属硫族

化物纳米管等^[16-20]. 2020 年, Xiang 等^[21]首次实现了不同种类纳米管同轴嵌套的可控生长, 该项工作使得一维材料的功能化设计与组装成为可能, 极大地拓宽了一维材料的属性范围, 同时也促使更多种类的新型纳米管亟待被发现及对其性能的深入探究^[22,23].

磷烯(单层黑磷)是由磷原子构成的褶皱蜂窝结构二维半导体材料, 具备高载流子迁移率, 可调节直接带隙以及显著面内各向异性等特点^[24-28]. 目前, 已有很多基于磷烯新型器件的报道^[29-32], 但是磷烯存在着易氧化与稳定性差的应用壁垒^[33-36]. 沿特定方向卷曲磷烯可以构建一维磷烯管状结构, 即磷烯纳米管, 目前磷烯纳米管尚未实现实验合成. 理论研究表明, 磷烯纳米管的应变能高于碳纳米管, 对于直径相近的磷烯纳米管, 扶手椅型纳米管的应变能远小于锯齿型, 表明扶手椅型磷烯纳米管的稳定性更佳. 不论是扶手椅型还是锯齿型磷烯纳米管, 均为直接带隙半导体, 且带隙大小可以通

[†] 通信作者. E-mail: tingli430@lnnu.edu.cn

过沿轴向施加应变进行调控, 其特性显著区别于其他类型的纳米管. 此外, 通过适当的掺杂, 磷烯纳米管可以在室温获得卓越的热电性能^[37-40].

低维纳米材料不仅超薄超轻, 而且兼具强度与韧性, 研究低维材料的力学特性具有重要意义, 特别是在下一代新型轻质、柔性器件领域的研究与应用^[41-45]. 目前, 对磷烯纳米管力学特性的研究仍相对有限, 已有工作主要探究了磷烯纳米管在不涉及热波动即 0 K 条件下的力学特性, 或是针对结构更为稳定的扶手椅型磷烯纳米管展开力学性能分析^[46-53]. 研究表明, 磷烯纳米管的热稳定温度与其直径存在显著依赖性, 当直径大于某阈值时, 磷烯纳米管可在较高温度下保持结构的稳定^[49,54]. 基于此, 本文选取了直径足够大且尺寸相近的扶手椅型与锯齿型磷烯纳米管作为研究对象, 采用分子动力学模拟方法, 对其热稳定性以及在不同温度条件下的拉伸和压缩力学特性进行系统探究, 本研究可以进一步拓宽对一维材料力学特性的理解, 为未来一维材料新器件的研究与应用提供指导.

2 模型与方法

磷烯的原子结构如图 1(a) 所示, 紫色和绿色用于区分不同层的磷原子, 磷烯元胞为正交结构, 沿扶手椅和锯齿方向的晶格常数分别为 4.57 Å 和 3.34 Å^[55]. 分别沿扶手椅和锯齿方向卷曲磷烯可以得到如图 1(b), (c) 所示的扶手椅型与锯齿型磷烯纳米管. 本文扶手椅型磷烯纳米管的卷曲指数为 (0, 44), 锯齿型磷烯纳米管的卷曲指数为 (60, 0),

纳米管的直径和长度分别为 6.4 nm 与 40 nm, 力学参数计算中纳米管的厚度取为 5.24 Å^[56,57].

本文的分子动力学计算通过 LAMMPS (large-scale atomic/molecular massively parallel simulator) 软件包^[58]来完成. 势函数采用 Jiang^[59]提供的参数化 Stillinger-Weber 势来描述磷原子之间的相互作用. 磷烯纳米管在轴向上采用周期性边界条件, 在径向采用自由边界条件. 本文计算中的时间步长为 0.4 fs, 在每一次计算前均采用共轭梯度算法对初始模型进行能量最小化处理.

热稳定性计算中, 将模拟体系置于正则系综 (NVT) 通过 Nose-Hoover 热浴进行弛豫, 开始时温度设定为 300 K, 弛豫时间为 200 ps, 然后通过 200 ps 的时间将体系温度由 300 K 升至目标温度, 最后在目标温度下进行长达 4000 ps 的弛豫, 在此期间监测体系的势能变化与结构的完整性, 期间每隔 10000 个时间步长对势能进行统计, 并与监测初始时刻的势能相减得到势能的变化量.

力学特性计算中, 首先将模拟体系在等温等压系综 (NPT) 下弛豫 200 ps, 使磷烯纳米管在给定温度下充分释放轴向的残余应力, 然后在正则系综下以 0.0001 ps^{-1} 的应变速率使磷烯纳米管在轴向产生拉伸 (压缩) 形变, 期间每隔 10000 个时间步长对应力与应变进行统计. 原子应力根据维里定理进行计算, 应变的大小通过计算纳米管在轴向上的长度变化与初始长度之比得到^[60]. 本文通过拟合应力-应变关系曲线小应变区域 (应变 ≤ 0.01) 的斜率得到磷烯纳米管的拉伸 (压缩) 模量. 本文的力学特性计算均进行 4 组独立模拟实验.

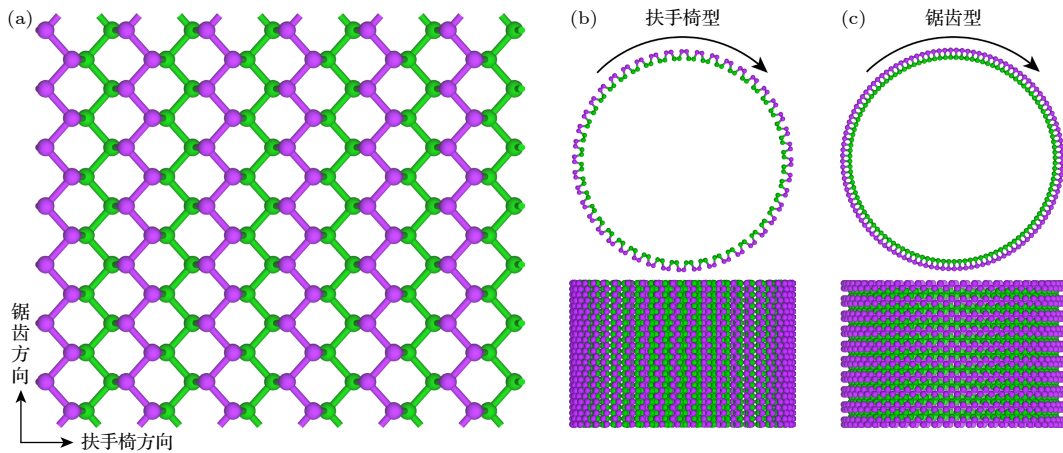


图 1 低维磷烯纳米结构的原子示意图 (a) 二维磷烯; (b) 扶手椅型磷烯纳米管; (c) 锯齿型磷烯纳米管

Fig. 1. Atomic configuration of low-dimensional phosphorene nanostructures: (a) Two-dimensional phosphorene; (b) armchair phosphorene nanotube; (c) zigzag phosphorene nanotube.

3 结果与讨论

3.1 磷烯纳米管的热稳定性

磷烯纳米管在临界稳定温度附近的势能变化如图2所示, 其中势能的下降意味着纳米管结构的损伤和失效. 可以看到, 本文所研究的两种不同手型磷烯纳米管均可以在 300 K 以上稳定存在. 扶手椅型磷烯纳米管的热稳定温度为 390 K, 锯齿型磷烯纳米管的热稳定温度为 320 K, 高于此临界温度的磷烯纳米管将由于原子剧烈的热振动无法保持结构的完整性. 这表明在直径接近的情况下, 扶手椅型磷烯纳米管的热稳定性优于锯齿型磷烯纳米管, 扶手椅型磷烯纳米管对环境温度具有更高的抵抗能力.

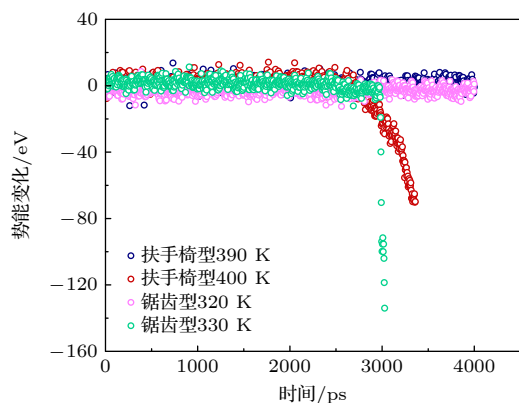


图2 不同温度下扶手椅型和锯齿型磷烯纳米管的势能随时间的变化

Fig. 2. Variations in the potential energy of armchair and zigzag phosphorene nanotubes at different critical temperatures.

磷烯中磷原子 sp^3 杂化键的强度远低于石墨烯碳原子间 sp^2 杂化的键合强度, 理论计算结果显示二维磷烯的热稳定温度在 430 K 左右^[55,61], 而管状结构则引入了与曲率相关的形变, 直径越小曲率越大. 较弱的键合强度和弯曲后沿圆周方向较大的变形使得磷烯纳米管的热稳定性比碳纳米管要差很多. 曲率相关的形变与原子剧烈的热振动会使磷烯纳米管的 P—P 键断裂, 表现在纳米管结构的损伤及失稳. 磷烯纳米管初始损伤的随机性随着温度升高而增大, 而曲率的增大则显著削弱其对环境温度的抵抗能力. 在特定温度下, 扶手椅型磷烯纳米管的失效由其外层 P—P 键的断裂以及内层原子的强吸引力所致. 对于锯齿型磷烯纳米管, 纳米管

的层内键角相较未弯曲的二维磷烯显著增大, 其失效主要是由此类键角的屈曲所引起^[54]. 因此, 若想获得稳定的磷烯纳米管结构, 需同时考虑纳米管的直径以及温度的因素.

3.2 磷烯纳米管的拉伸力学特性

磷烯纳米管在不同温度下的拉伸应力-应变关系曲线如图3所示, 考虑到磷烯纳米管的热稳定性, 力学特性研究中扶手椅型磷烯纳米管的温度范围为 50—350 K, 锯齿型磷烯纳米管的温度范围为 50—300 K. 可以看到, 温度强烈影响应力-应变曲线, 每条曲线中应力的突然下降代表纳米管的断裂, 磷烯纳米管沿轴向拉伸的结构失稳属于脆性断裂. 通过应力与应变的关系可以得到拉伸模量、断裂强度和断裂应变这些关键力学参数. 其中, 拉伸应力的峰值即为磷烯纳米管的断裂强度, 其所对应的应变即为磷烯纳米管的断裂应变. 拉伸模量、断裂强度和断裂应变随温度的变化如图4所示. 图4(a)表明扶手椅型和锯齿型磷烯纳米管的拉伸模量均随着温度的升高而有所降低, 不同手型纳米管的拉伸模量具有显著的各向异性. 以 300 K 为例, 扶手椅型和锯齿型磷烯纳米管的拉伸模量分别为 90.36 GPa 和 20.14 GPa. 扶手椅型和锯齿型磷烯纳米管的轴向取向分别对应二维磷烯面内的锯齿方向和扶手椅方向, 为验证其轴向力学性质, 将本文计算结果与已有二维磷烯拉伸模量的研究结果进行对比. 例如, Sha 等^[56]报道的拉伸模量为 90.5 GPa(锯齿方向)和 20.9 GPa(扶手椅方向), Li 和 Yang^[62]则报道为 92.35 GPa(锯齿方向)和 16.57 GPa(扶手椅方向). 本文所得磷烯纳米管的轴向刚度与相应取向上二维磷烯的刚度相一致, 表明二者具有相近的弹性特性.

从图4(b), (c)可以看出, 温度对磷烯纳米管的断裂强度和断裂应变具有重要的影响, 随着温度升高磷烯纳米管的断裂强度和断裂应变均显著降低. 当温度从 50 K 升至 300 K, 扶手椅型和锯齿型磷烯纳米管的断裂强度分别降低了 49.0% 与 50.5%, 断裂应变分别降低了 60.0% 与 56.0%. 温度的升高使得体系中的磷原子获得更多的能量来克服能量势垒, P—P 化学键更容易达到临界键长而发生断裂, 热软化效应显著削弱了磷烯纳米管沿轴向抗拉伸形变的能力. 在 300 K, 本文计算得到的扶手椅型与锯齿型磷烯纳米管的断裂强度分别为 3.43 GPa

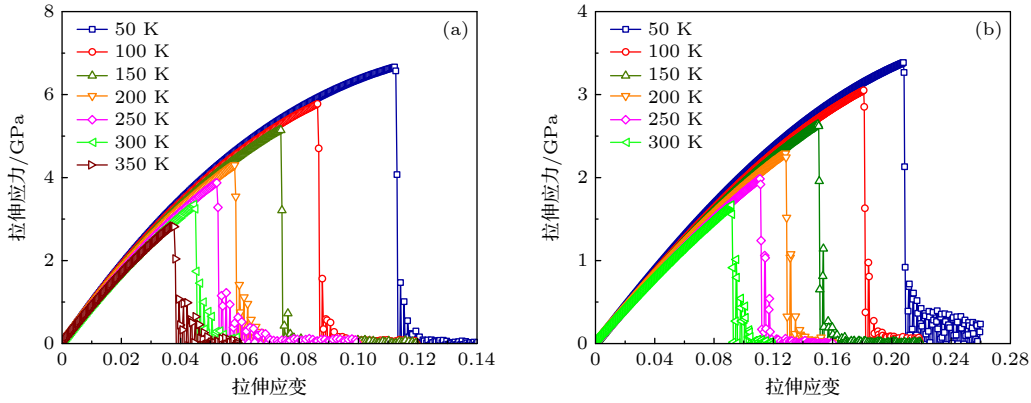


图3 不同温度下磷烯纳米管的拉伸应力-应变曲线 (a) 扶手椅型; (b) 锯齿型

Fig. 3. Tensile stress-strain curves for (a) armchair and (b) zigzag phosphorene nanotubes at different temperatures.

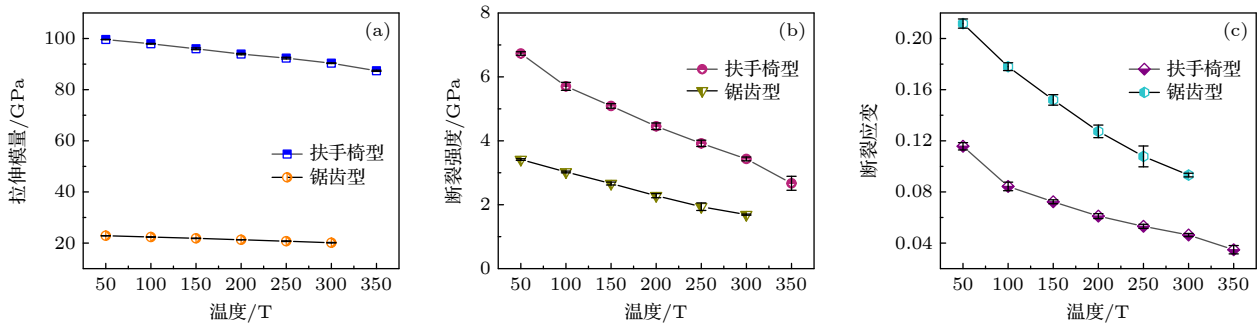


图4 不同温度下扶手椅型和锯齿型磷烯纳米管的拉伸力学特性 (a) 拉伸模量随温度的变化; (b) 断裂强度随温度的变化; (c) 断裂应变随温度的变化

Fig. 4. Mechanical properties of armchair and zigzag phosphorene nanotubes at different temperatures for tensile deformation: (a) Tensile modulus versus temperature; (b) fracture strength versus temperature; (c) fracture strain versus temperature.

和 1.69 GPa, 断裂应变分别为 0.0463 和 0.0932. 这意味着在直径接近的情况下, 锯齿型磷烯纳米管具有比扶手椅型磷烯纳米管更低的断裂强度但同时具备更高的断裂应变, 锯齿型磷烯纳米管具有更好的轴向延展性, 在拉伸断裂前可以承受更大的变形, 这一结论与二维磷烯在面内扶手椅方向具有更好的延展性相一致. 通过对比发现, 本文计算所得磷烯纳米管的断裂强度和断裂应变均低于相应二维磷烯的报道值 [56,62]. 这表明将二维磷烯弯曲形成纳米管结构后, 其沿轴向 (垂直于圆周方向) 的抗拉伸变形能力被削弱. 卷曲引入的几何曲率使纳米管壁原子处于预应变状态, 即原子键相较于平面状态已有一定程度的伸长或键角畸变, 预应变效应消耗了部分键的承载能力, 使得磷烯纳米管在承受外加拉伸载荷时, 能够容纳的额外弹性变形减小, 因此表现为断裂强度与断裂应变均低于二维磷烯.

室温下磷烯纳米管的断裂过程原子形貌如图 5 所示. 当拉伸应变达到临界断裂应变时, P—P 键

断裂形成初始裂纹, 随后裂纹迅速扩展并贯穿整个横截面, 最终导致纳米管整体断裂. 可以清晰观察到, 锯齿型磷烯纳米管的断裂表面十分光滑, 而扶手椅型磷烯纳米管的断裂表面则相对粗糙, 这一断裂形貌特征与二维磷烯在面内相应取向上的裂纹扩展行为高度相似.

3.3 磷烯纳米管的压缩力学特性

磷烯纳米管在不同温度下的压缩应力-应变关系曲线如图 6 所示. 相比拉伸应力-应变曲线与温度显著的依赖关系, 温度对磷烯纳米管的压缩力学行为存在影响, 但程度相对较弱. 在纳米管结构发生失稳前, 压缩应力随应变的增大呈近似线性上升趋势. 通过压缩应力与应变的关系可以得到压缩模量、屈曲强度和屈曲应变这些关键力学参数. 其中, 压缩应力的峰值即为磷烯纳米管的屈曲强度, 其所对应的应变即为磷烯纳米管的屈曲应变. 压缩模量、屈曲强度和屈曲应变随温度的变化如图 7 所示.

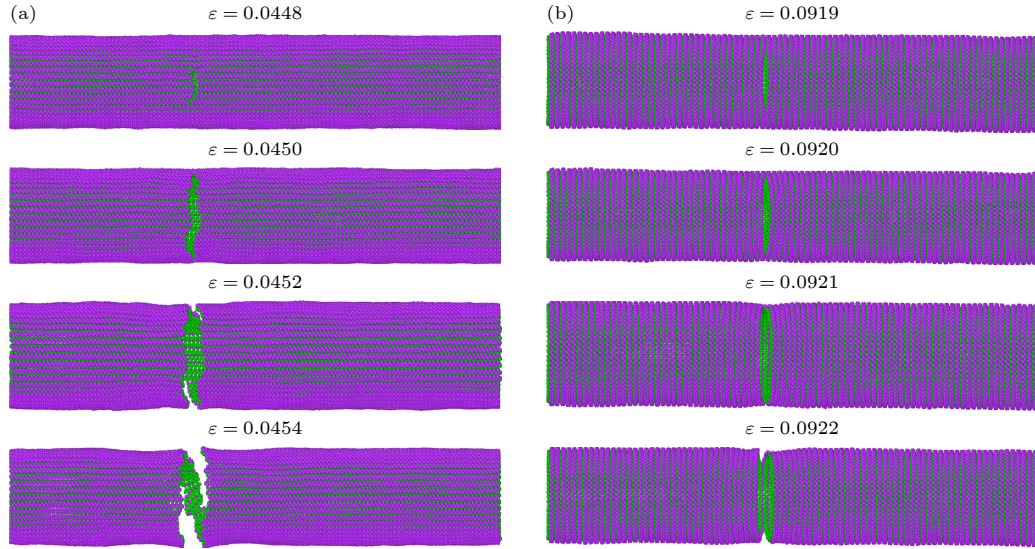


图 5 室温下磷烯纳米管在不同拉伸应变下的瞬时结构 (a) 扶手椅型; (b) 锯齿型

Fig. 5. Instantaneous structures of (a) armchair and (b) zigzag phosphorene nanotubes with different tensile strains at room temperature.

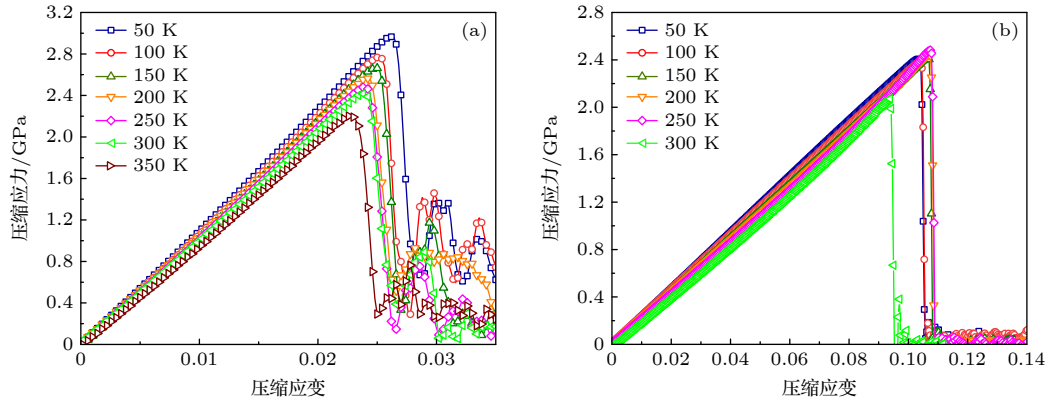


图 6 不同温度下磷烯纳米管的压缩应力-应变曲线 (a) 扶手椅型; (b) 锯齿型.

Fig. 6. Compressive stress-strain curves for (a) armchair and (b) zigzag phosphorene nanotubes at different temperatures.

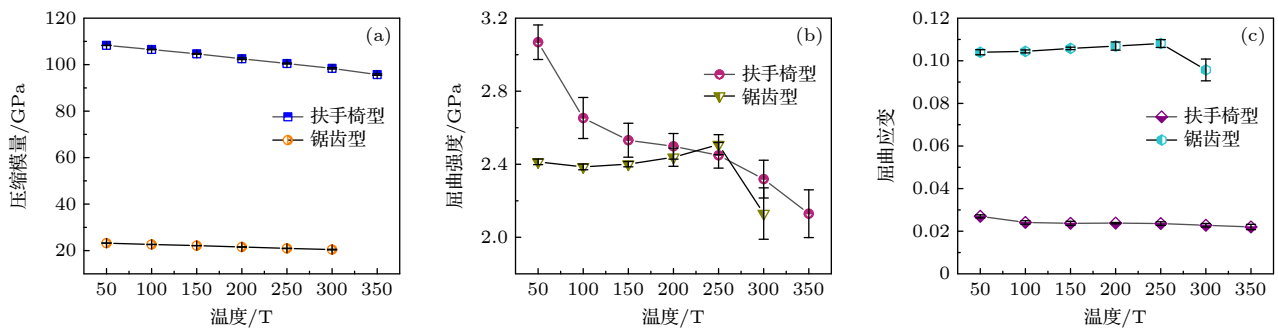


图 7 不同温度下扶手椅型和锯齿型磷烯纳米管的压缩力学特性 (a) 压缩模量随温度的变化; (b) 屈曲强度随温度的变化; (c) 屈曲应变随温度的变化

Fig. 7. Mechanical properties of armchair and zigzag phosphorene nanotubes at different temperatures for compressive deformation: (a) Compressive modulus versus temperature; (b) buckling strength versus temperature; (c) buckling strain versus temperature.

图 7(a) 表明扶手椅型和锯齿型磷烯纳米管的压缩模量随着温度的升高而有所降低, 不同手型磷烯纳米管的压缩模量同样具有显著的各向异性. 在 300 K,

扶手椅型和锯齿型磷烯纳米管的压缩模量分别为 98.40 GPa 和 20.43 GPa, 将该结果与已有二维磷烯压缩模量的研究结果进行对比, 如 Li 和 Yang^[62]

报道的压缩模量为 101.13 GPa (锯齿方向) 和 19.81 GPa (扶手椅方向), 这表明磷烯纳米管在压缩形变下的轴向刚度同样与二维磷烯相应取向上具有相近的弹性特性.

图 7(b), (c) 展示了温度对磷烯纳米管屈曲强度和屈曲应变的影响. 与拉伸形变下断裂强度和断裂应变对温度的显著依赖性不同, 仅扶手椅型磷烯纳米管的屈曲强度随温度升高呈单调下降趋势, 当温度从 50 K 升至 300 K 时, 其屈曲强度降低了 24.4%, 而屈曲应变基本不受温度影响. 对于锯齿型磷烯纳米管, 当温度不超过 250 K 时, 其屈曲强度与屈曲应变受温度影响较小, 表现出良好的压缩力学稳定性; 但在 300 K 时屈曲强度和屈曲应变均急剧下降. 该现象在 Zhao 等 [53] 对 (21, 21) 阶梯型磷烯纳米管的研究结果中同样被观察到, 该研究指出在温度转变点 (250 K) 附近, 磷烯纳米管在结构失效前的原子构型存在根本差异, 从而导致力学响应发生突变. 在较低温度下, 磷烯纳米管先发生屈曲, 随后在屈曲引起的局部大变形与高应力集中区域发生断裂; 而当温度高于转变点时, 磷烯纳米管则在未发生明显屈曲前就直接发生了原子键层面的断裂.

本研究计算表明, 室温下扶手椅型与锯齿型磷

烯纳米管的屈曲强度分别为 2.32 GPa 与 2.13 GPa, 屈曲应变分别为 0.0228 与 0.0957, 表明锯齿型磷烯纳米管相比扶手椅型纳米管虽屈曲强度略低, 但其屈曲应变更高, 可以承受更大的压缩形变. 进一步将该结果与二维磷烯的压缩力学性能进行对比. 研究表明, 磷烯的压缩应力-应变关系曲线与磷烯纳米管不同, 应力在达到屈服点后进入塑性变形的近平坦区, 当压缩程度超过其极限应变时, 应力出现骤降, 此时材料发生破坏, 并且磷烯的屈曲强度存在显著的尺寸效应 [62]. 通过外推对比, 本文计算得到的磷烯纳米管的屈曲强度显著高于相应取向二维磷烯的强度, 而纳米管的临界应变较未卷曲是降低的. 当磷烯被卷曲成管状结构后会受到环向约束的“加固”效应, 磷原子在环向上相互支撑, 原本在平面内自由发展的屈曲模态受到了管状几何的环向约束, 抑制了局部屈曲的萌生和扩展, 导致强度的升高. 同时因为卷曲引入的预应变使纳米管可承载的额外几何变形空间减小, 磷烯纳米管一旦发生屈曲, 应力急剧下降, 属于突发性的整体结构失稳, 而不是像磷烯那样的渐进式塑性褶皱, 因此磷烯纳米管的临界压缩应变低于磷烯.

图 8 展示了扶手椅型和锯齿型磷烯纳米管在达到临界屈曲应变后继续被压缩的原子构型演化

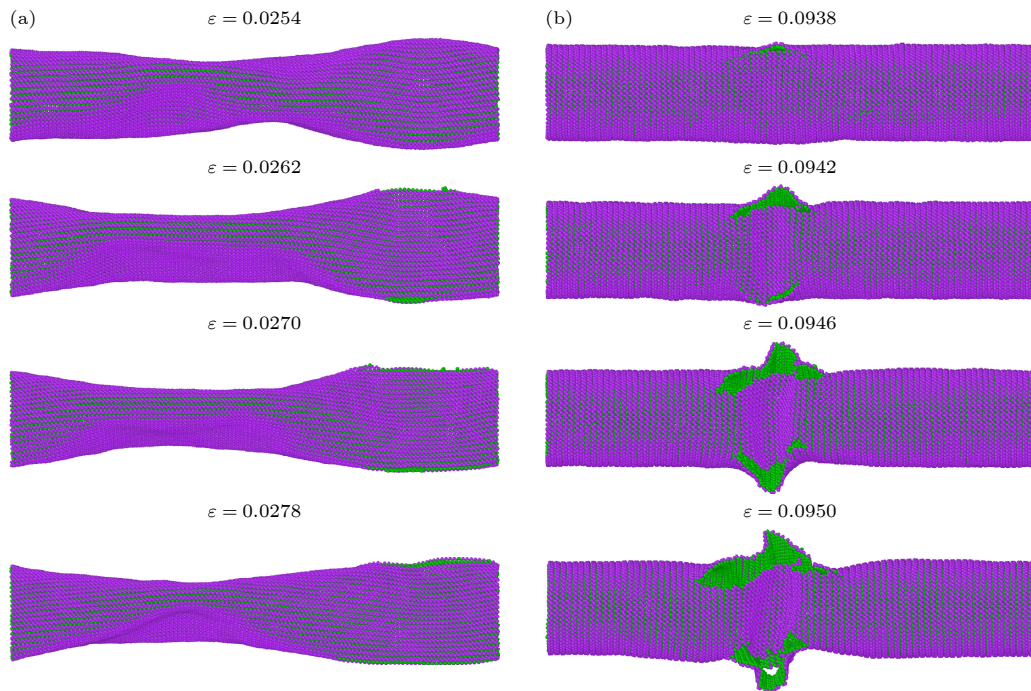


图 8 室温下磷烯纳米管在不同压缩应变下的瞬时结构 (a) 扶手椅型; (b) 锯齿型

Fig. 8. Instantaneous structures of (a) armchair and (b) zigzag phosphorene nanotubes with different compression strains at room temperature.

过程. 两种手型的磷烯纳米管在压缩过程中轴线均保持平直, 表明其屈曲模式均为局部屈曲而非整体屈曲, 该现象可归因于较大直径纳米管在屈曲时具有较低的弯曲应变能密度^[53]. 然而, 两种手型磷烯纳米管的失稳机制存在显著差异. 对于扶手椅型磷烯纳米管, 在压缩应变达到临界屈曲应变时, 并未立即出现化学键的断裂或结构损伤, 表明其破坏过程主要由局部屈曲主导的结构失稳, 即几何构型使其先发生屈曲, 而其屈曲强度与屈曲应变仍保持较好稳定性. 相比之下, 锯齿型磷烯纳米管在达到临界屈曲应变后结构立即失稳并塌陷, 属于局部压溃主导的材料失效. 由于锯齿型磷烯纳米管的热稳定性较差, 300 K 已经接近其临界稳定温度, 高温下原子键强度降低, 导致化学键在结构发生屈曲失稳前即发生断裂. 随着压缩应变进一步增大, 扶手椅型磷烯纳米管逐渐出现沿轴向扩展的光滑裂纹; 而锯齿型磷烯纳米管达到临界屈曲应变时即已出现初始结构损伤并形成多条裂纹, 随着应变增大, 裂纹沿轴向扩展, 纳米管的结构塌陷程度持续加剧.

4 结 论

本文采用分子动力学方法系统研究了扶手椅型和锯齿型磷烯纳米管的热稳定性与力学特性. 热稳定性研究结果表明, 两类手型磷烯纳米管在室温以上均可稳定存在, 其临界稳定温度分别为 390 K (扶手椅型) 和 320 K (锯齿型). 其中, 扶手椅型磷烯纳米管具有更好的热稳定性, 而当温度超过临界稳定值时磷烯纳米管将因原子剧烈热振动而失稳.

力学特性方面, 两种手型磷烯纳米管在拉伸与压缩模量上均呈现显著各向异性. 在 300 K 时, 扶手椅型和锯齿型磷烯纳米管的拉伸模量分别为 90.36 GPa 和 20.14 GPa, 压缩模量分别为 98.40 GPa 和 20.43 GPa, 磷烯纳米管沿轴向的刚度与相应取向二维磷烯的弹性特性基本一致. 磷烯纳米管的拉伸性能受温度影响显著: 随着温度从 50 K 升至 300 K, 扶手椅型和锯齿型磷烯纳米管的断裂强度分别下降 49.0% 与 50.5%, 断裂应变分别下降 60.0% 与 56.0%. 热软化效应使 P—P 键在较低应变下即达到临界键长而断裂, 导致轴向抗拉伸能力降低. 在 300 K 时, 扶手椅型和锯齿型磷烯纳米管的断裂强度分别为 3.43 GPa 与 1.69 GPa, 断裂应变分别为 0.0463 与 0.0932. 在直径接近的情况下, 尽管锯

齿型磷烯纳米管的断裂强度较低, 但其断裂应变更高, 表明其轴向延展性优于扶手椅型纳米管. 与二维磷烯的拉伸力学性能相比, 由于预应变主导的弱化效应使其卷曲形成纳米管后轴向的抗拉伸能力下降.

磷烯纳米管的压缩力学行为对温度的依赖性相对较弱. 扶手椅型磷烯纳米管的屈曲强度随温度升高单调下降 (50—300 K 下降 24.4%), 而屈曲应变基本不受温度影响. 锯齿型磷烯纳米管在温度低于 250 K 时力学响应稳定, 但在 300 K 时屈曲强度和屈曲应变均急剧下降, 这与该温度已接近其热稳定极限有关, 导致磷烯纳米管在屈曲发生前即出现原子键的断裂. 室温下, 扶手椅型和锯齿型磷烯纳米管的屈曲强度分别为 2.32 GPa 与 2.13 GPa, 屈曲应变分别为 0.0228 与 0.0957, 表明在直径接近的情况下, 锯齿型磷烯纳米管的屈曲强度略低, 但其屈曲应变更高, 可以在结构失稳前承受更大的压缩形变量. 与二维磷烯相比, 形成纳米管后轴向临界屈曲应变降低, 但是屈曲强度反而增强. 这是由于环向约束的“加固”效应抑制了局部屈曲的萌生和扩展, 导致纳米管屈曲强度的升高, 同时磷烯纳米管的屈曲属于突发性的局部结构失稳, 而非二维磷烯的渐进式塑性褶皱, 预应变使纳米管可容纳的额外几何变形空间减小, 纳米管的临界压缩应变低于二维磷烯. 原子构型演化分析表明两类手型磷烯纳米管受压时均发生局部屈曲, 但其在 300 K 时的失稳机制不同: 扶手椅型磷烯纳米管属于局部屈曲主导的结构失稳, 几何构型在发生屈曲后产生断裂; 锯齿型磷烯纳米管则为局部压溃主导的材料失效, 当温度接近其临界稳定温度时, 高温下因键强减弱而在结构发生屈曲前先发生断裂. 本文研究结果进一步深化了对一维纳米材料力学行为的理解, 为基于磷烯纳米管的功能器件设计与应用提供了理论依据.

参考文献

- [1] Novoselov K S, Fal'ko V I, Colombo L, Gellert P R, Schwab M G, Kim K 2012 *Nature* **490** 192
- [2] Xu M S, Liang T, Shi M M, Chen H Z 2013 *Chem. Rev.* **113** 3766
- [3] Liu Y, Duan X D, Shin H J, Park S, Huang Y, Duan X F 2021 *Nature* **591** 43
- [4] Akinwande D, Petrone N, Hone J 2014 *Nat. Commun.* **5** 5678
- [5] Novoselov K S, Mishchenko A, Carvalho A, Neto A H C 2016 *Science* **353** aac9439

- [6] Liu Y, Weiss N O, Duan X D, Cheng H, Huang Y, Duan X F 2016 *Nat. Rev. Mater.* **1** 16042
- [7] Cai Z Y, Liu B L, Zou X L, Cheng H M 2018 *Chem. Rev.* **118** 6091
- [8] Yang X D, Li J, Song R, Zhao B, Tang J M, Kong L G, Huang H, Zhang Z W, Liao L, Liu Y, Duan X F, Duan X D 2023 *Nat. Nanotechnol.* **18** 471
- [9] Guo H W, Hu Z, Liu Z B, Tian J G 2021 *Adv. Funct. Mater.* **31** 2007810
- [10] Zhang Z W, Chen P, Duan X D, Zang K T, Luo J, Duan X F 2017 *Science* **357** 788
- [11] Desai S B, Madhupraty S R, Sachid A B, Llinas J P, Wang Q, Ahn G H, Pitner G, Kim M J, Bokor J, Hu C, Wong H P, Javey A 2016 *Science* **354** 99
- [12] Zhang J, Wei Y, Yao F R, Li D Q, Ma H, Lei P, Fang H H, Xiao X Y, Lu Z X, Yang J H, Li J B, Jiao L Y, Hu W D, Liu K H, Liu K, Liu P, Li Q Q, Lu W, Fan S S, Jiang K L 2017 *Adv. Mater.* **29** 1604469
- [13] Li X Z, Wei Y, Wang Z J, Kong Y, Su Y P, Lu G T, Mei Z, Su Y, Zhang G Q, Xiao J H, Liang L, Li J, Li Q Q, Zhang J, Fan S S, Zhang Y G 2023 *Nat. Commun.* **14** 111
- [14] Qiu C G, Zhang Z Y, Xiao M M, Yang Y J, Zhong D L, Peng L M 2017 *Science* **355** 271
- [15] Cai B, Tan J N, Zhang L, Xu D G, Dong J S, Ouyang G 2023 *Phys. Rev. B* **108** 045416
- [16] Otsuka K, Sugihara T, Inoue T, Jia W, Matsushita S, Saito T, Lee M, Taniguchi T, Watanabe K, Pitner G, Li M, Chao T, Xiang R, Chiashi S, Maruyama S 2023 *Nano Res.* **16** 12840
- [17] Matsushita S, Otsuka K, Sugihara T, Zhu G, Kittipaisalsilpa K, Lee M, Xiang R, Chiashi S, Maruyama S 2023 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **15** 10965
- [18] Furusawa S, Nakanishi Y, Yomogida Y, Sato Y, Zheng Y, Tanaka T, Yanagi K, Suenaga K, Maruyama S, Xiang R, Miyata Y 2022 *ACS Nano* **16** 16636
- [19] An Q W, Xiong W Q, Hu F, Yu Y K, Lv P F, Hu S Q, Gan X T, He X T, Zhao J L, Yuan S J 2024 *Nat. Mater.* **23** 347
- [20] Nakanishi Y, Furusawa S, Sato Y, Tanaka T, Yomogida Y, Yanagi K, Zhang W, Nakajo H, Aoki S, Kato T, Suenaga K, Miyata Y 2023 *Adv. Mater.* **35** 2306631
- [21] Xiang R, Inoue T, Zheng Y J, Kumamoto A, Qian Y, Sato Y, Liu M, Tang D M, Gokhale D, Guo J, Hisama K, Yotsumoto S, Ogamoto T, Arai H, Kobayashi Y, Zhang H, Hou B, Anisimov A, Maruyama M, Miyata Y, Okada S, Chiashi S, Li Y, Kong J, Kauppinen E I, Ikuhara Y, Suenaga K, Maruyama S 2020 *Science* **367** 537
- [22] Xiang R, Maruyama S, Li Y 2022 *Natl. Sci. Open* **1** 20220016
- [23] Xiang R, Maruyama S 2021 *Small Sci.* **1** 2000039
- [24] Carvalho A, Wang M, Zhu X, Rodin A S, Su H, Neto A H C 2016 *Nat. Rev. Mater.* **1** 16061
- [25] Khandelwal A, Mani K, Karigerasi M H, Lahiri I 2017 *Mater. Sci. Eng. B* **221** 17
- [26] Liu H, Neal A T, Zhu Z, Luo Z, Xu X F, Tománek D, Ye P D 2014 *ACS Nano* **8** 4033
- [27] Wang H Y, Song Y C, Huang G Y, Ding F, Ma L Y, Tian N, Qiu L, Li X, Zhu R M, Huang S Y, Yan H G, Chen X H, Ding L P, Zheng C L, Ruan W, Zhang Y B 2024 *Nat. Mater.* **23** 470
- [28] Yang M M, Li X J, Duan S, Zhang X R, Sun H R, Chen X, Su T C, Gu L, Liu X B 2022 *Adv. Energy Mater.* **12** 2203014
- [29] Du K X, Lv Q J, Liang Z P, Liu G W, Hussain S, Liu J L, Qiao G J 2023 *ACS Appl. Nano Mater.* **6** 3159
- [30] Li L K, Yu Y J, Ye G J, Ge Q Q, Ou X D, Wu H, Feng D L, Chen X H, Zhang Y B 2014 *Nat. Nanotech.* **9** 372
- [31] Deng Y X, Luo Z, Conrad N J, Liu H, Gong Y J, Najmaei S, Ajayan P M, Luo J, Xu X F, Ye P D 2014 *ACS Nano* **8** 8292
- [32] Chang T Y, Chen P L, Yan J H, Li W Q, Zhang Y Y, Luo D L, Li J X, Huang K P, Liu C H 2020 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12** 1201
- [33] Island J O, Steele G A, Zant H S J, Castellanos-Gomez A 2015 *2D Mater.* **2** 011002
- [34] Avsar A, Vera-Marun I J, Tan J Y, Watanabe K, Taniguchi T, Neto A H C, Ozyilmaz B 2015 *ACS Nano* **9** 4138
- [35] Gillgren N, Wickramaratne D, Shi Y, Espiritu T, Yang J, Hu J, Wei J, Liu X, Mao Z, Watanabe K, Taniguchi T, Bockrath M, Barlas Y, Lake R K, Lau C N 2015 *2D Mater.* **2** 011001
- [36] Liu X L, Wood J D, Chen K S, Cho E K, Hersam M C 2015 *J. Phys. Chem. Lett.* **6** 773
- [37] Sorkin V, Cai Y, Ong Z, Zhang G, Zhang Y W 2017 *Crit. Rev. Solid State Mater. Sci.* **42** 1
- [38] Guo H Y, Lu N, Dai J, Wu X J, Zeng X C 2014 *J. Phys. Chem. C* **118** 14051
- [39] Chen X, Duan S, Yi W C, Singh D J, Guo J G, Liu X B 2020 *Small* **16** 2001820
- [40] Fernández-Escamilla H N, Guerrero-Sánchez J, Martínez-Guerra E, Takeuchi N 2019 *J. Phys. Chem. C* **123** 7217
- [41] Pantano M F, Kuljanishvili I 2020 *Nano Ex.* **1** 022001
- [42] Kim J H, Jeong J H, Kim N, Joshi R, Lee G 2019 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **52** 083001
- [43] Zhan H, Guo D, Xie G X 2019 *Nanoscale* **11** 13181
- [44] Jiang H J, Zheng L, Liu Z, Wang X W 2019 *InfoMat.* **2** 1077
- [45] Deng S K, Sumant A V, Berry V 2018 *Nano Today* **22** 14
- [46] Sorkin V, Zhang Y W 2016 *Nanotech.* **27** 395701
- [47] Zhang W, Yin J R, Zhang P, Ding Y H 2017 *RSC Adv.* **7** 51466
- [48] Sorkin V, Zhang Y W 2018 *Nanotech.* **29** 235707
- [49] Liao X B, Hao F, Xiao H, Chen X 2016 *Nanotech.* **27** 215701
- [50] Cai K, Wan J, Wei N, Qin Q H 2016 *Nanotech.* **27** 275701
- [51] Liu P, Pei Q X, Huang W, Zhang Y W 2017 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **50** 485303
- [52] Chen W H, Yu C F, Chen I C, Cheng H C 2017 *Comput. Mater. Sci.* **133** 35
- [53] Zhao Z Q, Yin H, Cai K, Zhou W Q 2018 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20** 3465
- [54] Cai K, Wan J, Wei N, Cai H F, Qin Q H 2016 *Nanotech.* **27** 235703
- [55] Li T 2021 *Physica E* **131** 114761
- [56] Sha Z D, Pei Q X, Ding Z, Jiang J W, Zhang Y W 2015 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **48** 395303
- [57] Hong Y, Zhang J C, Huang X P, Zeng X C 2015 *Nanoscale* **7** 18716
- [58] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [59] Jiang J W 2015 *Nanotech.* **26** 315706
- [60] Li T, Tang Z A, Huang Z X, Yu J 2017 *Physica E* **85** 137
- [61] Pei Q X, Zhang X L, Ding Z W, Zhang Y Y, Zhang Y W 2017 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** 17180
- [62] Li L L, Yang J 2017 *Nanotech.* **28** 475701

Thermal stability and mechanical properties of phosphorene nanotubes

LI Ting[†] KONG Jingwen YANG Jiayun HUANG Yingzhu XIAO Zhe

(School of Physics and Electronic Technology, Liaoning Normal University, Dalian 116029, China)

(Received 23 January 2026; revised manuscript received 17 February 2026)

Abstract

Phosphorene nanotubes (PNTs), one-dimensional counterparts of monolayer black phosphorus, exhibit chirality-dependent physical properties due to the inherent anisotropy of the phosphorene lattice. In this work, we perform molecular dynamics simulations to systematically investigate the thermal stability and mechanical behavior of armchair (0, 44) and zigzag (60, 0) PNTs with comparable diameters (~ 6.4 nm) under both tensile and compressive loadings across a temperature range of 50–300 K. Thermal stability analysis reveals that both PNTs remain stable above room temperature, with critical stability thresholds of 390 K for armchair and 320 K for zigzag PNTs, indicating superior thermal resilience of the armchair configuration. Mechanical characterization demonstrates pronounced anisotropy in both tensile and compressive moduli. At 300 K, the tensile moduli are 90.36 GPa (armchair) and 20.14 GPa (zigzag), while the compressive moduli are 98.40 GPa (armchair) and 20.43 GPa (zigzag). These values closely mirror the elastic behavior of monolayer phosphorene along corresponding crystallographic orientations. A strong thermal softening effect degrades tensile performance: as temperature increases from 50 K to 300 K, the fracture strength decreases by approximately 50% for both chiralities, accompanied by a 55%–60% reduction in fracture strain. At 300 K, the armchair PNT exhibits higher fracture strength (3.43 GPa) but lower fracture strain (0.046) than the zigzag PNT (1.69 GPa and 0.093). Under compression, the temperature dependence is relatively weak overall. However, a striking chirality-specific failure mechanism emerges near the thermal stability limit. At 300 K, armchair PNTs fail via buckling-dominated structural instability, whereas zigzag PNTs undergo crushing-dominated material failure where thermally weakened P–P bonds rupture before buckling occurs. At room temperature, the buckling strengths are 2.32 GPa (armchair) and 2.13 GPa (zigzag), with corresponding buckling strains of 0.023 and 0.096, indicating superior compressibility of zigzag PNTs despite slightly lower strength. Compared to monolayer phosphorene, the curvature-induced prestrain from rolling into nanotubes weakens the axial tensile capacity—both tensile strength and fracture strain are reduced. Under compression, the critical buckling strain also decreases after rolling. However, the buckling strength increases for both chiralities due to the “reinforcing effect” of the tubular geometry’s circumferential constraint.

Keywords: phosphorene nanotubes, thermal stability, mechanical properties, molecular dynamics

DOI: [10.7498/aps.75.20260124](https://doi.org/10.7498/aps.75.20260124)

CSTR: [32037.14.aps.75.20260124](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20260124)

[†] Corresponding author. E-mail: tingli430@lnnu.edu.cn



磷烯纳米管的热稳定性与力学特性

李婷 孔婧文 杨佳云 黄滢竹 肖哲

Thermal stability and mechanical properties of phosphorene nanotubes

LI Ting KONG Jingwen YANG Jiayun HUANG Yingzhu XIAO Zhe

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 120705 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20260124

CSTR: 32037.14.aps.75.20260124

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20260124>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

剪切形变下磷烯的力学和热学性能

Mechanical and thermal properties of phosphorene under shear deformation

物理学报. 2023, 72(12): 126201 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230084>

纳米氧化锌改性纤维素绝缘纸力学和热学性能的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of mechanical and thermal properties of nano-zinc oxide modified cellulose insulating paper

物理学报. 2024, 73(12): 127701 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240208>

不同荷载作用下二维硼烯的力学性能及变形破坏机理

Mechanical properties and deformation mechanisms of two-dimensional borophene under different loadings

物理学报. 2024, 73(11): 116201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240066>

分层化金属陶瓷光热转换涂层的微结构构筑与热稳定性

Microstructure building and thermal stability of cermet-based photothermal conversion coatings with layered structures

物理学报. 2023, 72(5): 057103 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221693>

重金属缓冲层和覆盖层对TbFeCo超薄膜磁性及热稳定性的影响

Magnetic properties and thermal stability of ultrathin TbFeCo films encapsulated by heavy metals Pt and W

物理学报. 2023, 72(7): 077501 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222239>

外尔半金属WTe₂/Ti异质结的热稳定性拉曼散射研究

Thermal stability study of Weyl semimetal WTe₂/Ti heterostructures by Raman scattering

物理学报. 2022, 71(19): 197501 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220712>