

# 本征单壁碳纳米管电子结构对电子热导率的研究

朱方容, 陈政丽莎

贵州大学大数据与信息工程学院, 贵州 贵阳

收稿日期: 2026年5月4日; 录用日期: 2026年5月28日; 发布日期: 2026年6月4日

## 摘要

碳纳米管(CNT)热输运以声子主导、电子辅助为基本特征, 电子热导率虽占室温总热导率比例较低, 但在高温、高偏压或强电场条件下贡献显著, 是调控碳纳米管热性能的重要途径。本文采用密度泛函理论, 系统研究扶手椅型与锯齿型单壁碳纳米管(SWNT)的能带结构、带隙特征与费米能级态密度, 阐明电子结构参数与电子热导率之间的内在关联。结果表明: 扶手椅型SWNT具有更窄的带隙和更高的费米能级态密度, 其电子热导率显著优于锯齿型SWNT; 管径2 nm为电子结构调控临界值, 小于2 nm时量子限域效应主导电子热导率变化。研究揭示了碳纳米管电子热导率的微观调控机制, 为碳基导热材料的热性能优化提供理论依据。

## 关键词

碳纳米管, 能带, 态密度, 电子热导率

# Study on Electronic Structure and Electronic Thermal Conductivity of Single-Walled Carbon Nanotubes

Fangrong Zhu, Zhenglisha Chen

College of Big Date and Information Engineering, Guizhou University, Guiyang Guizhou

Received: May 4, 2026; accepted: May 28, 2026; published: June 4, 2026

## Abstract

The thermal transport of carbon nanotubes (CNTs) is characterized by phonon-dominated and

electron-assisted contributions. Although electronic thermal conductivity accounts for a small proportion of the total thermal conductivity at room temperature, it becomes significant under high temperature, high bias or strong electric field, serving as a key way to regulate the thermal performance of CNTs. In this paper, density functional theory is adopted to systematically investigate the band structure, band gap characteristics and density of states at the Fermi level of armchair and zigzag single-walled carbon nanotubes (SWNTs), and clarify the inherent correlation between electronic structure parameters and electronic thermal conductivity. The results show that armchair SWNTs possess a narrower band gap and higher density of states at the Fermi level, leading to superior electronic thermal conductivity compared with zigzag SWNTs. A critical diameter of 2 nm exists for electronic structure regulation, and quantum confinement effect dominates the variation of electronic thermal conductivity when the diameter is less than 2 nm. This study reveals the microscopic regulation mechanism of electronic thermal conductivity in CNTs, providing a theoretical basis for the thermal performance optimization of carbon-based thermal conductive materials.

## Keywords

Single-Walled Carbon Nanotubes, Band Structure, Density of States, Electronic Thermal Conductivity

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

随着微电子器件向微型化、高集成度方向快速发展, 界面热阻与局部过热问题日益突出, 热管理已成为制约器件性能与寿命的关键瓶颈。单壁碳纳米管(SWNT)具有超高轴向热导率、优异力学性能及独特一维电子结构, 在柔性散热膜、热界面材料及高功率器件热管理领域展现出巨大应用潜力。

碳纳米管是全球性能最优异的柔性导热材料之一, 其热导率约为金刚石的两倍[1]。碳纳米管热输运以声子贡献为主、电子贡献为辅。室温条件下, 声子热导率占总热导率 95%以上, 电子热导率贡献不足 5%; 而在高温、高掺杂或强电场环境中, 电子热导率占比可提升至 10%~20%, 直接影响整体热输运效率。SWNT 的电子结构高度依赖手性构型与管径尺寸: 扶手椅型 SWNT 多呈现金属性或窄带隙半导体特性, 锯齿型 SWNT 多为宽带隙半导体, 二者电子态分布差异显著。当管径小于 2 nm 时, 一维量子限域效应增强, 带隙随管径减小急剧增大, 费米能级态密度发生重构, 进而显著调控电子热导率。

目前, 国内外研究多集中于碳纳米管声子热输运特性, 针对电子热导率的定量关联、量子调控机制及手性差异本质的系统研究仍较为缺乏。本文基于密度泛函理论, 系统计算不同手性、不同管径 SWNT 的能带结构、带隙及费米能级态密度, 阐明电子结构参数与电子热导率的内在关联, 揭示管径 2 nm 附近的量子调控规律, 为碳基导热材料的热性能优化与构型设计提供理论支撑。

## 2. 碳纳米管结构特性

碳纳米管(Carbon Nanotubes, CNT)是一类由碳原子通过  $sp^2$ 杂化形成的一维纳米管状材料, 是空六边形晶格, 具有典型蜂窝状石墨片卷曲结构, 具体结构如图 1。根据石墨烯片的卷曲方式, CNT 可分为扶手椅型(Armchair)、锯齿型(Zigzag)和手性型(Chiral)三类, 其电子结构、热学性质高度依赖手性指数( $n, m$ )。扶手椅型 CNT 多呈现金属性或窄带半导体特性, 锯齿型 CNT 多为半导体, 手性 CNT 则兼具复杂电子行为。手性差异直接决定 CNT 能带结构和费米能级态密度, 进而调控电子热导率、电导率等输运特性。

碳纳米管因其独特的一维量子限域效应、优异的力学、电学与热学性能, 成为纳米材料科学、凝聚态物理及电子信息领域的重要研究对象[2]。

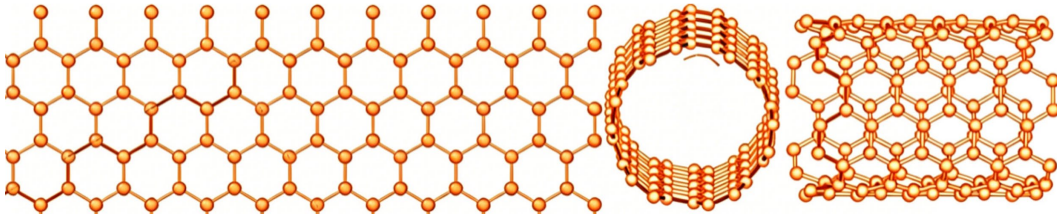


Figure 1. Schematic diagram of carbon nanotube structural curling  
图 1. 碳纳米管结构卷曲原理图

碳纳米管具有超高轴向热导率, 为 3200 W/mK [3]、优异的力学强度[4]、高载流子迁移率、可调电子结构等优异特性, 在微电子热管理、柔性电子[5]、储能器件、航空航天散热等领域具有重要应用价值。随着电子器件向微型化、高集成度方向发展, 热管理压力日益严峻, 碳纳米管凭借优异热性能, 成为下一代高导热领域的核心候选材料[6]-[8]。

碳纳米管热输运以声子主导、电子辅助为基本特征: 室温下声子热导率占总热导率 95%以上, 电子热导率贡献较小; 但在高温、高偏压或强电场条件下, 电子热导率贡献显著提升, 成为调控整体热性能的关键因素。碳纳米管电子结构高度敏感于手性、管径。当管径小于 2 nm 时量子限域效应显著, 带隙、态密度突变, 直接影响电子热导率。

CNT 的结构计算公式为:

$$C_{CNT} = na_1 + ma_2 \quad (m, n \in N) \quad (2-1)$$

式中,  $m$  和  $n$  是手性指数, 且为整数。 $a_1$  和  $a_2$  是石墨烯的向量基矢,  $|a_1| = |a_2| = a_{c-c}$ 。

$$|C_{CNT}| = \sqrt{3}a_{c-c}\sqrt{m^2 + mn + n^2} \quad (2-2)$$

式中,  $a_{c-c}$  是碳原子间的键长。

CNT 的管径计算为:

$$d = |C_{CNT}|/\pi = \sqrt{3}a_{c-c} \cdot \sqrt{m^2 + mn + n^2}/\pi \quad (2-3)$$

由于考虑扶手椅型碳纳米管的手性指数  $(m_1, n_1)$ , 且  $m_1 = n_1 \neq 0$ ; 锯齿型碳纳米管的手性指数为  $(m_2, n_2)$ , 且手性指数  $m_2 > n_2 = 0$ 。 $\sqrt{3}a_{c-c} = a$ , 计算扶手椅型和锯齿型的管径分别为:

$$d_A = \sqrt{3}a \cdot n_A/\pi \quad (2-4)$$

$$d_C = a \cdot n_C/\pi \quad (2-5)$$

当  $d_A = d_C$  时, 扶手椅型单壁碳纳米管和锯齿型单壁碳纳米管的手性指数  $n$  相差  $|d| < 0.1 \text{ \AA}$  倍数。

本征单壁碳纳米管(Single-Walled Carbon Nanotubes, SWNT)是由单层石墨烯片沿特定方向卷曲形成的一维纳米管状材料, 具有典型  $sp^2$  杂化共价键结构, 直径通常在 0.4 nm~3 nm, 长度可达微米至毫米量级。

SWNT 电子结构高度敏感于管径变化。管径小于 2 nm 时, 量子限域效应显著, 能带分裂、带隙快速增大、费米能级态密度重构, 电子输运行为发生突变, 直接影响电子热导率; 管径大于 2 nm 时, 量子效应减弱, 电子结构趋于稳定, 电子热导率变化趋缓。因此, 2 nm 是 SWNT 电子结构与电子热导率调控的

关键临界尺寸。

### 3. 相关理论基础

#### 3.1. 密度泛函理论

密度泛函理论(Density Functional Theory, DFT)是从量子力学层面描述多电子体系基态性质的第一性原理方法[9]。它是用电子密度取代波函数作为体系基本变量,把复杂的多电子薛定谔方程转化为可计算的单电子方程,为碳纳米管、石墨烯等低维材料的电子结构、能带与态密度研究提供了主流理论框架[10]。

量子力学中,薛定谔方程可以直接描述多粒子系统的能量与状态关系。当包含  $N$  个电子和  $M$  个原子核的材料时,定态薛定谔方程可表示为:

$$\hat{H}\Psi(r_1, \dots, r_N, R_1, \dots, R_M) = E\Psi(r_1, \dots, r_N, R_1, \dots, R_M) \quad (3-1)$$

为了简化问题,将电子和核运动分离,方程简化为电子薛定谔方程:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 - \sum_{I=1}^M \frac{\hbar^2}{2M_I} \nabla_I^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{I=1}^M \frac{Z_I e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_i - R_I|} \\ & + \frac{1}{2} \left( \sum_{i \neq j}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_i - r_j|} + \sum_{I \neq J}^M \frac{Z_I Z_J e^2}{4\pi\epsilon_0 |R_I - R_J|} \right) \end{aligned} \quad (3-2)$$

式中,  $\hbar$  为约化普朗克常数 ( $\hbar = h/2\pi$ );  $m_e$  是电子静止质量;  $M_I$  表示第  $I$  个原子核的质量;  $Z_I$  表示第  $I$  个原子核的原子序数;  $e$  是电子电荷量的绝对值;  $\epsilon_0$  为真空介电常数。

尽管电子薛定谔方程简化了核运动影响,但多电子波函数仍然是高维、不可直接求解。为突破这一困境,密度泛函理论将描述体系的核心变量从波函数替换为电子密度,实现了从“不可解”到“可计算”的关键跨越。

多电子薛定谔方程高维难解,DFT以电子密度  $\rho(r)$  替代波函数,将  $3N$  维问题降为 3 维,实现可计算化。Hohenberg-Kohn 定理证明:基态密度唯一决定所有性质,奠定 DFT 理论基础[11]。

DFT 是处于外场中的多电子系统,基态所有物理性质均由基态电子密度  $\rho(r)$  唯一决定;基态能量是电子密度的唯一泛函  $E = E[\rho]$ ;对满足归一化条件的电子密度  $\rho(r)$ ,能量泛函  $E[\rho]$  取极小值时对应系统基态,为变分求解提供了严格依据。

为构建可直接求解的计算体系,将总能量泛函分解为:

$$E[\rho] = T_s[\rho] + V_{ext}[\rho] + E_H[\rho] + E_{xc}[\rho] \quad (3-3)$$

式中,  $T_s[\rho]$  为非相互作用电子动能;  $V_{ext}[\rho]$  为外场作用能;  $E_H[\rho]$  为电子间经典库仑能;  $E_{xc}[\rho]$  为交换关联能。

通过变分法可推导出 Kohn-Sham 单电子方程[12]:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V_{eff}(r) \right] \phi_i(r) = \epsilon_i \phi_i(r) \quad (3-4)$$

其中,  $V_{eff}(r)$  表示有效势场, Hartree 势  $V_H(r)$ , 交换关联势  $V_{xc}(r)$ , 具体公式如下:

$$V_{eff}(r) = V_{ext}(r) + V_H(r) + V_{xc}(r) \quad (3-5)$$

$$V_H(r) = \int \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |r - r'|} \rho(r') dr' \quad (3-6)$$

$$V_{xc}(r) = \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(r)} \quad (3-7)$$

交换关联泛函的精度是决定材料电子结构计算可靠性的核心因素。由于电子间交换与关联作用的量子本质复杂, 目前尚无精确解析形式, 但在实际计算中往往依赖近似方法, 包括有局域密度近似(Local Density Approximation, LDA)、广义梯度近似(Generalized Gradient Approximation, GGA)及杂化泛函方法。

LDA 是最早发展的基础近似方法, 是将非均匀电子体系分解为一系列无限小的局域均匀子区域, 每个子区域内的电子密度近似为常数。通过对各子区域的交换关联能密度进行积分, 即可得到整个体系的交换关联能。交换关联能泛函的公式为:

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(r)] = \int d^3r \rho(r) \varepsilon_{xc}[\rho(r)] \quad (3-8)$$

式中,  $\varepsilon_{xc}[\rho(r)]$  为局域均匀电子气的交换关联能密度。

然而, LDA 会忽略电子密度梯度信息, 在分子和复杂固体等非均匀体系中出现偏差。而 GGA 则引入了电子密度的梯度信息, 将交换关联能泛函的构造从仅依赖局域电子密度扩展到同时考虑密度的空间变化率, 从而显著提升了对非均匀电子体系的描述精度。交换关联能泛函为:

$$E_{xc}^{GGA}[\rho(r)] = \int d^3r \rho(r) \varepsilon_{xc}[\rho(r), \nabla \rho(r)] \quad (3-9)$$

式中,  $\nabla \rho(r)$  为电子密度梯度。

目前常用的 GGA 泛函包括 Perdew-Wang (PW91) 和 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 等。本文采用广义梯度近似(GGA)下的 PBE 泛函描述交换关联能, 适用于碳基材料  $sp^2$  杂化体系, 可精准描述碳纳米管电子结构特征。

### 3.2. 热导率

碳纳米管热传导主要由声子热传导和电子热传导共同贡献, 总热导率满足:

$$\kappa_{total} = \kappa_{phonon} + \kappa_{electron} \quad (3-10)$$

式中,  $\kappa_{phonon} \geq \kappa_{electron}$  为声子热导率,  $\kappa_{phonon} \geq \kappa_{electron}$  为电子热导率。

室温条件下, 碳纳米管以声子热导率主导, 占比超过 95%; 但在高温、高掺杂或强电场条件下, 电子热导率贡献显著提升, 成为调控热性能的关键因素。在绝缘体和本征半导体中, 电子载流子浓度低, 热传导几乎由声子主导; 在金属材料中, 自由电子浓度高, 电子热导率占总热导率 90% 以上; 在掺杂半导体、半金属或高温环境下, 电子载流子浓度提升, 电子热导率占比增加, 与声子热导率共同调控整体热输运性能[13]。

电子热导率公式为:

$$\kappa_{electron} = L\sigma T \quad (3-11)$$

式中,  $L$  是洛伦兹数(金属近似  $L = 2.44 \times 10^{-8} \text{ W } \Omega/\text{K}$ );  $\sigma$  是电导率;  $T$  是热力学温度。

电导率由费米能级态密度、载流子浓度与迁移率共同决定:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*} \quad (3-12)$$

式中,  $n$  为载流子浓度,  $e$  为电子电荷量,  $\tau$  为弛豫时间,  $m^*$  为有效质量。费米能级态密度越高、有效质量越小, 电导率越大, 电子热导率越高。

碳纳米管电子热导率由能带结构、带隙、费米能级态密度共同调控: 带隙越小, 电子跃迁势垒越低,

载流子浓度越高、迁移率越大, 电子热导率越大; 态密度越高, 参与热激发电子数越多, 电子热输运效率越高; 载流子的有效质量越小, 电子迁移率越高, 电子热导率越大。扶手椅型单壁碳纳米管窄带隙、高费米能级态密度、低有效质量, 电子热导率显著优于锯齿型; 管径小于 2 nm 时量子限域效应增强, 电子结构突变, 电子热导率敏感可调[14] [15]。

## 4. 计算方法

### 4.1. 模型构建

本文选取扶手椅型 SWNT ( $n, n$ )与锯齿型 SWNT ( $n, 0$ )为研究对象, 手性指数范围覆盖管径 0.5 nm~3.0 nm, 包含 0.5 nm、0.9 nm、1.5 nm、2.0 nm、2.6 nm、3.0 nm 六种典型管径, 管长统一设置为 30.3 nm, 构建周期性一维 SWNT 模型, 消除边界效应影响。

### 4.2. 参数设置

基于密度泛函理论, 采用 VASP 软件包进行第一性原理计算。交换关联能选用广义梯度近似(GGA)下的 PBE 泛函; 平面波基组截断能设置为 400 eV, 确保电子波函数展开充分。

### 4.3. 计算内容

系统计算不同手性、不同管径 SWNT 的能带结构、带隙、费米能级态密度; 基于费米能级态密度推导电导率并预测电子热导率; 对比分析扶手椅型与锯齿型 SWNT 电子结构差异, 阐明管径 2 nm 附近量子限域效应对电子热导率的调控规律。

## 5. 单壁碳纳米管电子结构与电子热导率关联

CNT 热导率由声子热导率与电子热导率共同构成, 其中声子贡献占比超 90%, 为热输运主导因素, 电子热导率虽占比较小, 但在高导电性场景下仍具有一定辅助作用。

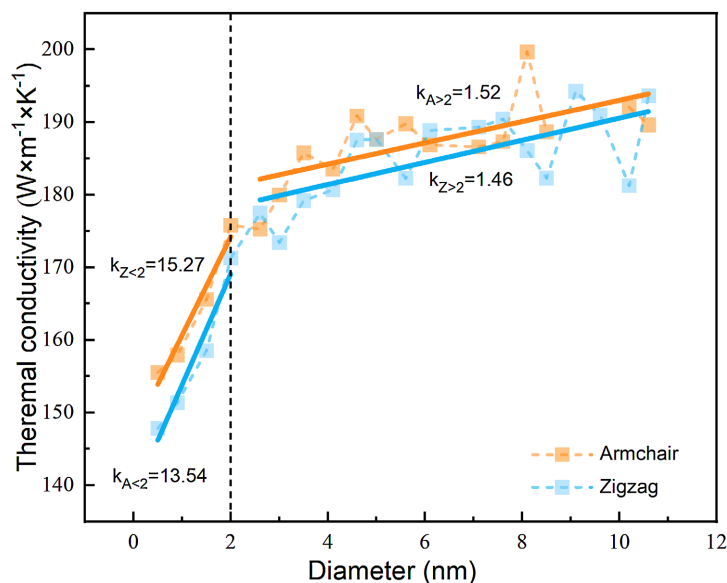
为了更全面地去分析微观电子结构对热导率的影响, 将对不同管径下的能态分布进行分析, 重点考察能带、态密度与热导率之间的关系。以 2 nm 这个特殊管径临界值, 将电子结构的分析重点放在管径 2 nm 临界值前后。

在室温 300 K 下, 20 组不同管径 SWNT 热导率计算结果如图 2 所示。扶手椅型 SWNT 的热导率整体高于锯齿型 SWNT。在弹道声子输运条件下(管长 < 40 nm), 管径在 0.5 nm~10.6 nm 范围内发生变化时, 管径对两种手性结构热导率的影响较小。在临界管径约 2 nm 附近, 两种手性结构都表现出明显不同的结构和管径依赖行为现象, 2 nm 成了热导率变化的关键转折点。

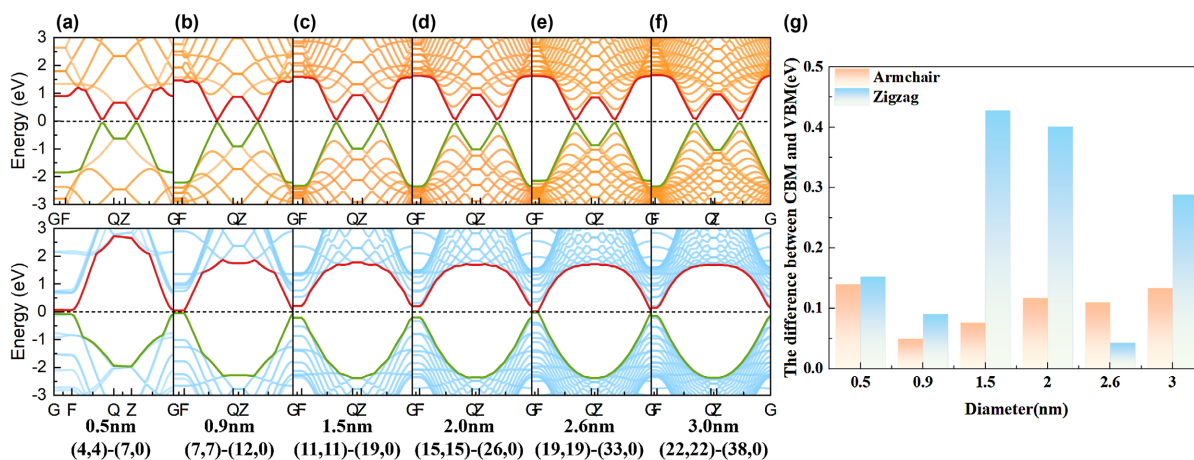
图 2 分别详细展示了采用 PBE 泛函计算 CNT 不同管径的能带分布情况与带隙特征。橙色代表扶手椅型 SWNT, 蓝色代表锯齿型 SWNT, 红色和绿色分别代表带顶(VBM)和导带底(CBM)曲线。为了方便分析观察, 能量范围统一设置在 -3 eV~3 eV 之间。SWNT 的导电性由其手性指数( $n, m$ )决定:  $n = m$  时为金属, 而当  $n + m$  的值是 3 的整数倍时材料为半导体。然而, 由于 PBE 泛函对电子关联的近似, 可能导致能带的闭合不完全, 部分扶手椅型 SWNT 及特定锯齿型 SWNT 呈现准金属特性。比如每组的扶手椅型, 以及 0.9 nm 组的锯齿型(12, 0)和 2.6 nm 组的锯齿型(33, 0), 均呈现出了准金属性质。扶手椅型 CNT 的热导率整体高于锯齿型 CNT, 核心源于声子振动模式更优、声子散射更少, 较窄的带隙与费米能级处较高的态密度, 也辅助提升了电子热输运贡献。

对于半导体和绝缘体, 由于自由电子较少, 电子热导率通常较低。如图 3, 可以看到 0.5 nm、0.9 nm、1.5 nm、2.0 nm、2.6 nm、3.0 nm 不同管径的带隙值。整体而言, 扶手椅型 SWNT 能带带隙显著小于锯齿

型 SWNT: 扶手椅型带隙为 0.05 eV~0.15 eV, 锯齿型带隙为 0.3 eV~0.45 eV。带隙越小, 电子跃迁所需能量越低, 热激发产生的载流子浓度越高, 电子迁移率越大, 进而提升电子热导率。因此, 扶手椅型 SWNT 电子热导率整体优于锯齿型 SWNT。



**Figure 2.** Thermal conductivity of 20 carbon nanotubes (length = 30.3 nm)  
**图 2.** 20 组管长为 30.3 nm 的碳纳米管组的热导率



**Figure 3.** Band structure and band gap values of intrinsic CNT with different diameters  
**图 3.** 不同管径下本征 CNT 的能带图和带隙值

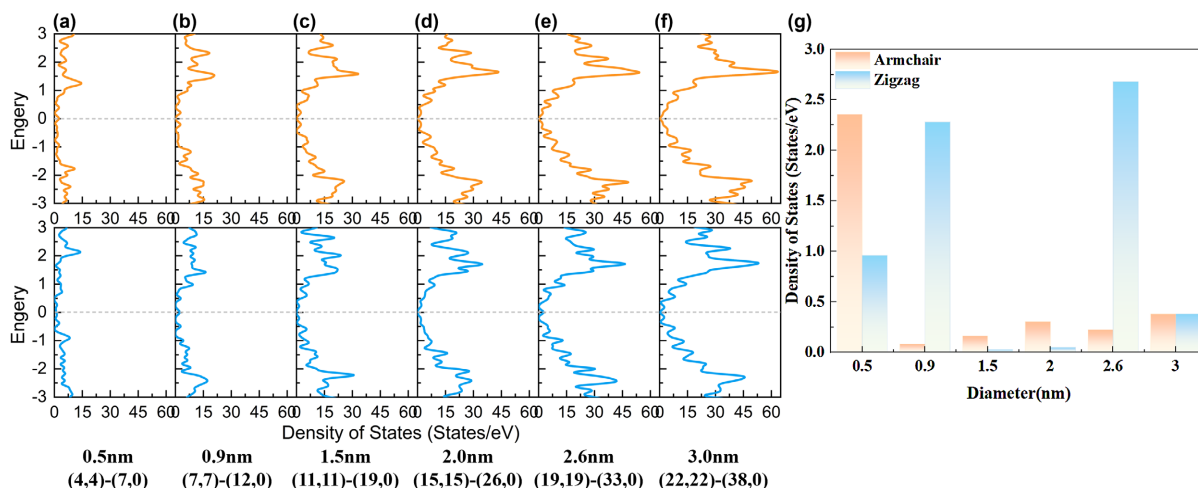
费米能级态密度直接反映费米能级附近可用电子态数量, 是决定载流子浓度与电子运输效率的关键因素之一。

为了进一步分析电子结构对热导率的影响, 不同管径的总态密度(Total Density of States, TDOS)及费米能级处态密度峰值如图 4 所示。其中, 橙色代表扶手椅型 SWNT, 蓝色代表锯齿型 SWNT。

结果表明, 除少数准金属锯齿型 SWNT 外, 扶手椅型 SWNT 费米能级态密度峰值显著高于锯齿型 SWNT, 尤其在费米能级附近, 较高的态密度意味着更多的电子参与热传导, 从而辅助增加了电子热导。

图 4(g)子图展示了不同管径扶手椅型和锯齿型 SWNT 在费米能级处的态密度峰值差异, 从图中可知, 除

了 0.9 nm 组的锯齿型(12, 0)和 2.6 nm 组的锯齿型(33, 0)呈现准金属性质, 有较高的态密度峰值, 其余情况扶手椅型 SWNT 都存在相对更高的态密度峰值。费米能级态密度越高, 参与热传导的电子数量越多, 电子热输运效率越高, 电子热导率越大。高费米能级态密度是扶手椅型 SWNT 电子热导率优于锯齿型的核心原因。



**Figure 4.** Density of states and Fermi-level DOS peak of intrinsic CNT with different diameters

**图 4.** 不同管径下本征 CNR 的态密度和费米能级处的态密度峰值

经过以上实验分析, 管径 2 nm 是 SWNT 电子结构与电子热导率调控的关键临界值。管径小于 2 nm 时, 一维量子限域效应显著, 电子波函数受限, 带隙随管径减小快速增大、费米能级态密度重构, 电子热导率随管径减小急剧下降, 呈现强管径依赖性; 管径大于 2 nm 时, 量子限域效应减弱, 电子结构趋于稳定, 带隙与费米能级态密度变化平缓, 电子热导率趋于饱和, 管径依赖性显著降低。扶手椅型 SWNT 窄带隙、高费米能级态密度特性, 使其在不同管径条件下均保持较高电子热导率; 锯齿型 SWNT 宽带隙、低费米能级态密度特性, 电子热导率整体偏低, 且对管径变化更为敏感。管径 2 nm 附近电子结构的突变, 为 SWNT 电子热导率的精准调控提供关键依据。

## 6. 结论

本文基于密度泛函理论, 系统研究扶手椅型与锯齿型 SWNT 电子结构对电子热导率的调控机制, 结论如下: 手性主导电子热导率差异: 扶手椅型 SWNT 窄带隙(0.05 eV~0.15 eV)、高费米能级态密度(0.1985 states/eV~2.371 states/eV), 电子热导率显著优于锯齿型; 经过实验分析可知, 2 nm 为临界调控值: 管径 < 2 nm 时, 量子限域效应显著, 电子热导率敏感可调; 管径 > 2 nm 时趋于饱和; 电子热导率为热性能重要补充: 扶手椅型 SWNT 电子热导率贡献更大, 为热性能优化提供重要途径。研究厘清了碳纳米管电子结构与电子热导率定量关联, 为碳基导热材料热性能精准调控、构型优化提供理论支撑, 助力微电子热管理、柔性电子等场景应用。

## 参考文献

- [1] Marconnet, A.M., Panzer, M.A. and Goodson, K.E. (2013) Thermal Conduction Phenomena in Carbon Nanotubes and Related Nanostructured Materials. *Reviews of Modern Physics*, **85**, 1295-1326. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.85.1295>
- [2] Qiu, L., Zhang, X., Guo, Z. and Li, Q. (2021) Interfacial Heat Transport in Nano-Carbon Assemblies. *Carbon*, **178**, 391-412. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2021.02.105>

- 
- [3] Kim, P., Shi, L., Majumdar, A. and McEuen, P.L. (2001) Thermal Transport Measurements of Individual Multiwalled Nanotubes. *Physical Review Letters*, **87**, Article ID: 215502. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.87.215502>
- [4] 李恩熙, 杨亮. 单壁碳纳米管性能特点及其制备[J]. 化纤与纺织技术, 2024, 53(12): 8-10.
- [5] Ma, X., Wang, Y., Wang, C., Zhang, Y., Fu, P. and Du, F. (2024) Enhanced Thermoelectric Properties of Exfoliated BN Nanosheets/Single-Walled Carbon Nanotube Composite Films for Applications in Flexible Electronics. *ACS Applied Nano Materials*, **7**, 15640-15647. <https://doi.org/10.1021/acsnm.4c02648>
- [6] Zhu, S., Ni, J. and Li, Y. (2020) Carbon Nanotube-Based Electrodes for Flexible Supercapacitors. *Nano Research*, **13**, 1825-1841. <https://doi.org/10.1007/s12274-020-2729-5>
- [7] Niu, T. (2020) Carbon Nanotubes Advance Next-Generation Electronics. *Nano Today*, **35**, Article ID: 100992. <https://doi.org/10.1016/j.nantod.2020.100992>
- [8] Lan, Y., Yang, Y., Wang, Y., Wu, Y., Cao, Z., Huo, S., *et al.* (2020) High-Temperature-Annealed Flexible Carbon Nanotube Network Transistors for High-Frequency Wearable Wireless Electronics. *ACS Applied Materials & Interfaces*, **12**, 26145-26152. <https://doi.org/10.1021/acsnm.0c03810>
- [9] Dubay, O., Kresse, G. and Kuzmany, H. (2001) Accurate Density Functional Calculations for the Phonon Dispersion Relations of Carbon Nanotubes. *Physical Review B*, **64**, Article ID: 235416.
- [10] Balandin, A.A. (2011) Thermal Properties of Graphene and Nanostructured Carbon Materials. *Nature Materials*, **10**, 569-581. <https://doi.org/10.1038/nmat3064>
- [11] Hohenberg, P. and Kohn, W. (1964) Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review*, **136**, B864-B871. <https://doi.org/10.1103/physrev.136.b864>
- [12] Kohn, W. and Sham, L.J. (1965) Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Physical Review*, **140**, A1133-A1138. <https://doi.org/10.1103/physrev.140.a1133>
- [13] Bader, C., Haddou, O. and Boutahir, M. (2026) Thermal Conductivity of Single-Walled Carbon Nanotubes (SWCNTs). In: El Mehdi, E. and Boutahir, M., Eds., *Advanced Materials for Sustainable Energy and Engineering*, Springer, 283-303. [https://doi.org/10.1007/978-3-032-10069-6\\_18](https://doi.org/10.1007/978-3-032-10069-6_18)
- [14] Su, W., Li, X., Li, L., Yang, D., Wang, F., Wei, X., *et al.* (2023) Chirality-Dependent Electrical Transport Properties of Carbon Nanotubes Obtained by Experimental Measurement. *Nature Communications*, **14**, Article No. 1672. <https://doi.org/10.1038/s41467-023-37443-7>
- [15] Tersoff, J. (1988) Empirical Interatomic Potential for Carbon, with Applications to Amorphous Carbon. *Physical Review Letters*, **61**, 2879-2882. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.61.2879>