

基于第一性原理的扶手椅型和锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管载流子迁移率研究

李鑫怡, 郭钰茹, 路俊哲*

(新疆师范大学 物理与电子工程学院 新疆发光矿物与光功能材料研究重点实验室, 新疆 乌鲁木齐 830054)

摘要: 本研究结合密度泛函第一性原理和形变势理论, 计算不同管径的扶手椅型 ($n = 3-8$) 和锯齿型 ($n = 4-9$) $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管的载流子迁移率。通过系统计算弹性模量、载流子有效质量及形变势常数等关键参数, 揭示了管径与手性对迁移行为的调控规律。结果表明, $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管的弹性模量范围为 $15.98-56.78 \times 10^{-8}$ J/m, 有效质量可调范围在 $0.16-0.98 m_0$, 形变势常数变化显著 ($0.28-8.04$ eV)。迁移率预测显示, 电子和空穴迁移率均呈现强烈的管径依赖特性, 最高电子迁移率出现在锯齿型 (5, 0), 达到 $193414 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, 空穴最高迁移率亦在同管型达 $35372 \text{ cm}^2/\text{Vs}$; 扶手椅型纳米管中, (3, 3) 和 (8, 8) 分别表现出较高的电子 ($2371 \text{ cm}^2/\text{Vs}$) 和空穴迁移率 ($717 \text{ cm}^2/\text{Vs}$)。通过系统评估 12 种不同手性纳米管的电学性能, 证实 C/BN 异质结可有效协同带隙调控与高迁移率特性, 为设计新一代高性能纳米电子器件提供了可靠的理论依据和材料候选体系。

关键词: 异质结纳米管; 载流子迁移率; 形变势理论; 第一性原理计算

中图分类号: TB383.1

文献标识码: A

文章编号: 1008-9659(2026)02-0050-08

随着摩尔定律逐渐逼近物理极限, 传统硅基半导体器件的特征尺寸缩减面临前所未有的挑战, 纳米电子学正成为后摩尔时代技术发展的核心驱动力^[1-2]。在纳米尺度电子器件中, 载流子迁移率作为衡量半导体材料电荷输运能力的基本物理参数, 直接决定器件的工作频率、功耗特性、响应速度和功率转换效率^[3-4]。高载流子迁移率不仅是实现高性能场效应晶体管、高速逻辑电路和高效光电器件的前提条件, 更是推动纳米电子器件向更高集成度、更低功耗方向发展的关键因素^[5-6]。因此, 对载流子输运机制的理论理解和精确预测已成为材料设计和器件优化的核心科学问题。

一维纳米管结构因其独特的几何约束效应和量子输运特性, 在高性能纳米电子器件中展现出巨大的应用潜力^[7-8]。实验测量表明, 碳纳米管 (CNTs) 作为最具代表性的一维纳米材料, 半导体性单壁碳纳米管的载流子迁移率已被证实高达 $\sim 80000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, 在长沟道器件中甚至可以达到场效应迁移率 $79000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 和本征迁移率 $> 100000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ^[9], 远超传统半导体材料^[10]。然而, CNTs 的电子特性高度依赖于手性指数 (n, m), 可能呈现金属性或半导体性, 且现有制备方法难以实现管径与类型的精确控制, 导致产品中金属性和半导体性纳米管混杂^[11-12]。氮化硼纳米管 (BNNTs) 作为 CNTs 的等电子体类似物, 具有优异的化学稳定性、热稳定性和机械强度^[13-15]。与 CNTs 显著不同的是, BNNTs 是带隙约 5.9 eV 的电绝缘体, 其电子特性与管几何结构基本无关, 故其成为理想的绝缘材料。由于极化的 B-N 键, BNNTs 表现为电绝缘体和光学透明材料, 室温载流子迁移率极低, 几乎表现为绝缘体行为^[16-17]。因此, 近期的综合研究提出了应变调控^[18]、化学掺杂^[19]、表面功能化^[20] 等策略来调节 BNNTs 的带隙, 以此改变其电子特性, 但这些方法往往以牺牲材料结构完整性和载流子迁移率为代价。

为克服单一组分纳米管的固有局限性, 异质结构工程成为当前纳米材料设计的前沿方向^[21-23]。早期理

[收稿日期] 2025-09-17

[修回日期] 2025-10-10

[基金项目] 新疆维吾尔自治区自然科学基金项目 (2022D01A224)。

[作者简介] 李鑫怡 (2001-), 女, 硕士研究生, 主要从事理论物理 (团簇物理) 方面研究, E-mail: 919434192@qq.com。

* [通讯作者] 路俊哲 (1979-), 女, 教授, 主要从事物理教学和计算凝聚态物理方面研究, E-mail: 723678610@qq.com。

论研究表明,C和BN片段在纳米管中的周期性交替会在能谱中产生窄的“迷你带”(mini-zones)^[12]。所谓“迷你带”是指,由于周期性异质结构导致的能带分裂和重构,在原本连续的导带或价带中形成的局域能带结构。这种“迷你带”的形成有助于调控电子态密度和载流子输运特性,为纳米电子器件提供新的调控自由度。已有研究主要集中在两种构型,即轴向分段异质结($C_k/(BN)_q$)和径向混合异质结($C_x/(BN)_{(1-x)}$)^[24-25]。 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结构作为径向混合异质结的典型代表,其带隙可在0~1.854 eV范围内调控,有效填补CNTs和BNNTs之间的带隙空白^[26]。

基于上述科学问题和技术需求,文章提出基于第一性原理的计算模型,结合形变势理论与有效质量近似,对扶手椅型和锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管的载流子迁移率进行预测。不仅为理解一维异质结纳米管的载流子输运机制提供了重要的理论基础,更为设计具有可调载流子迁移率的新型纳米电子材料开辟了新路径,对推动一维纳米材料在高性能场效应晶体管、光电探测器、太阳能电池等领域的应用具有重要科学意义和实际价值。

1 计算方法

1.1 形变势模型

本研究中,密度泛函理论(Density Functional Theory)的第一性原理计算在VASP软件包(Vienna Ab initio Simulation Package)中完成^[27]。采用广义梯度近似(Generalized Gradient Approximation)下的Perdu-Burke-Ernzerhof(PBE)^[28]泛函描述电子间的交换关联能。沿着b和c轴方向设置超过15Å的真空层厚度以屏蔽相邻原子间的相互作用。所有计算的平面波截断能量设置为520 eV。采用布里渊区中的 $10 \times 1 \times 1$ K点网格进行结构优化,电子步长和力的收敛阈值分别设置为 10^{-6} eV和0.01 eV/Å。以往研究声子散射主要采用多带玻尔兹曼方法,包括声学声子散射和光学声子散射。文章则采用形变势理论模型,即只考虑基于形变势理论的纵向声学声子散射,来研究扶手椅型和锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管的载流子迁移率。Bardeen等人^[29]在假设电子被声学声子散射时其能量变化与形变成正比的前提下,推导出本征载流子迁移率 μ 的解析表达式。随后,Beleznay等人^[30]在一维情况下重新推导迁移率的公式,得出如下形式

$$\mu = \frac{e\bar{\tau}}{m^*} = \frac{e\hbar^2 C}{(2\pi k_B T)^{1/2} |m^*|^3 E_1^2} \quad (1)$$

其中, $\bar{\tau}$ 表示声学声子平均散射弛豫时间,公式为 $\bar{\tau} = \hbar^2 C / (2\pi m^* k_B T)^{1/2} E_1^2$; m^* 表示电荷的有效质量,定义为 $m^* = \hbar^2 [\partial^2 E(k) / \partial^2 k]^{-1} |_{k=0}$,通过拟合导带底或价带顶附近的能量来计算。其中, $E(k)$ 为在价带顶(VBM,对应空穴)或导带底(CBM,对应电子)附近的能量色散关系, k 为波矢量。弹性模量 $C = (\partial^2 E_{total} / \partial \varepsilon^2) / L_0$,其中, E_{total} 为总能量变化, $\varepsilon = (L - L_0) / L_0$ 为单轴应变变量,应变 ε 定义为长度变化量与初始长度比值,形变势常数 $E_1 = dE_{edge} / d\varepsilon$,通过拟合能带边缘随形变一次函数得到。 T 设置为300 K。尽管式(1)中的所有物理量均通过第一性原理计算获得,但这只是对完整玻尔兹曼输运方程的一种简化处理方法,该方法已被应用于石墨烯纳米带^[31]的研究中。

2 计算结果及分析

2.1 能带结构

文章计算扶手椅型和锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管的能带结构(图1、图2)。计算结果表明,随着管径变大,扶手椅型(n, n)逐渐呈现金属性导体的零带隙结构,并明显保留了狄拉克锥特征。锯齿型($n, 0$)除个别少数外,呈现禁带结构特征,表明异质结能够有效打开非扶手椅型金属性SWCNTs的带隙。这一带隙调控范围与已有实验和理论研究结果^[25]基本一致,表明该结构的电子特性具备较好的可调性,为后续器件应用提供了可行性基础。同时可以看出,扶手椅型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管价带顶(VBM)和导带底(CBM)均位于 Γ 点与 X 点之间,锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管价带顶(VBM)和导带底(CBM)均位于 Γ 点附近。在无应变条件下,计算得到的带隙可在0~1.854 eV调控,与文献报道的值符合较好。锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管的能带间隙均大于1 eV,显示出在下一代电子器件中潜在的应用前景,更符合实验结果和实际应用的需求。

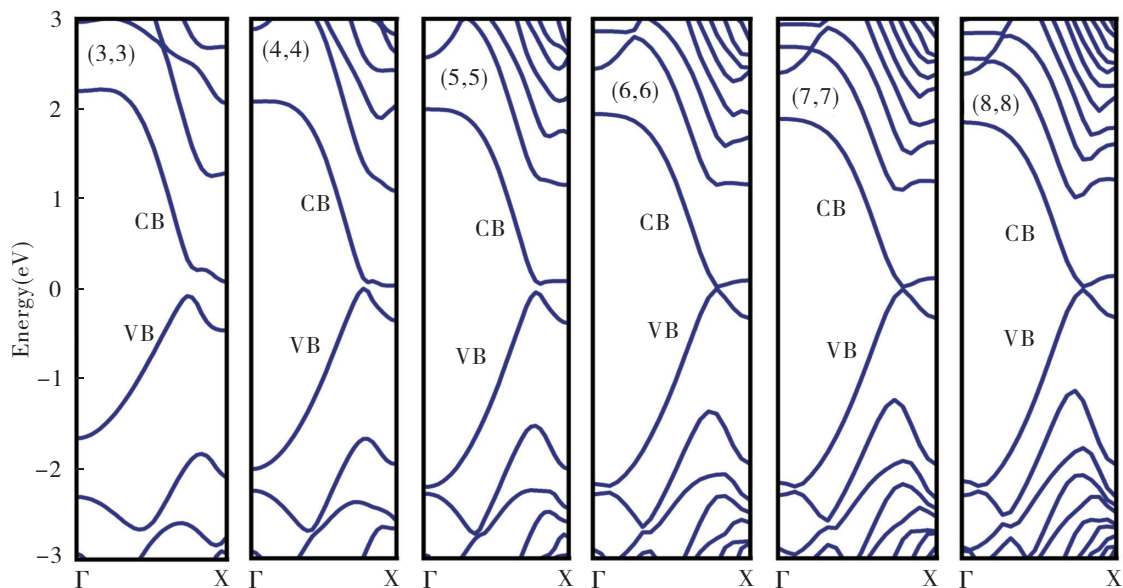


图1 扶手椅型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管(3,3)(4,4)(5,5)(6,6)(7,7)(8,8)沿着 $\Gamma \rightarrow X$ 方向的能带结构
(注:CB和VB分别代表导带和价带)

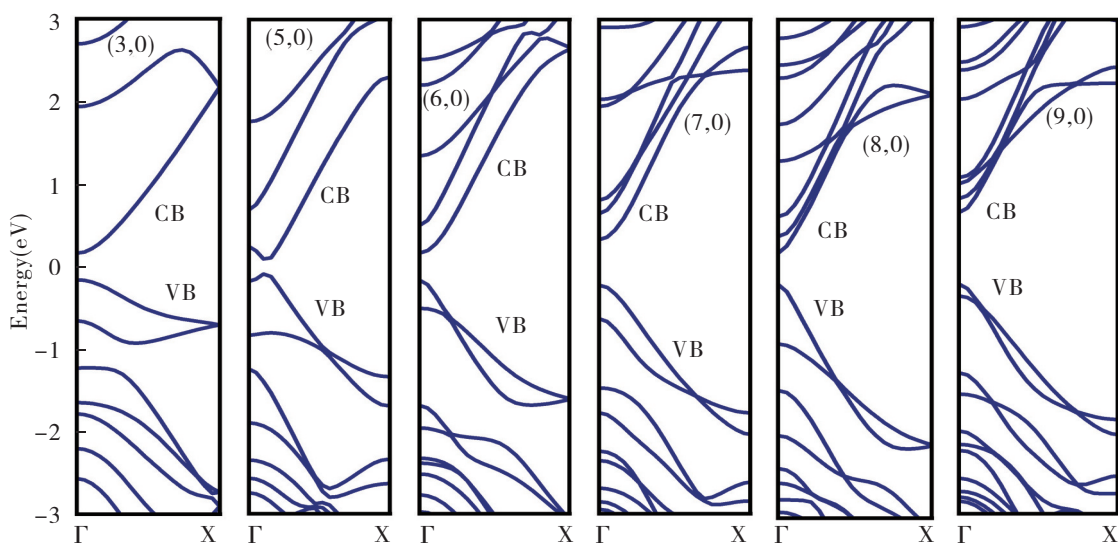


图2 锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管(4,0)(5,0)(6,0)(7,0)(8,0)(9,0)沿着 $\Gamma \rightarrow X$ 方向的能带结构
(注:CB和VB分别代表导带和价带)

2.2 形变势模型计算迁移率

弹性模量由总能量关于单轴形变的二阶导数所得到的曲率进行估算。为计算弹性模量,对扶手椅型和锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管在轴向方向上进行压缩和拉伸。在评估其弹性时,所有原子位置均被充分弛豫。首先计算无应变的结构,接着在小于5%的应变范围内,以1%的应变百分比为单位逐步施加应变(图3、图4)。图中清楚地显示了形变能随应变变化呈现出抛物线的形式,类似于由胡克定律在宏观弹簧体系中导出的抛物线势能。值得注意的是,相同的应变会在具有较大管径的单壁纳米管中引起更高的形变能量。这是由于在结构中,压缩/拉伸更多的C-C键所需能量的叠加效应。扶手椅型和锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管拉伸模量分别如图5(a)和图6(a)所示,从中可以更直观地看出,随着管径的变大,纳米管的弹性模量增大。

接下来,从能带结构的形状出发,分别计算扶手椅型和锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管的电子和空穴的有效质量。对导带底和价带顶的能量 $E(k)$ 与 k 点的关系分别进行曲线拟合,从而得到电子和空穴的有效质量 m_e^* 和 m_h^* (图5(b)、图6(b))。通常,电子的有效质量小于空穴的有效质量,如图6(b)所示的锯齿

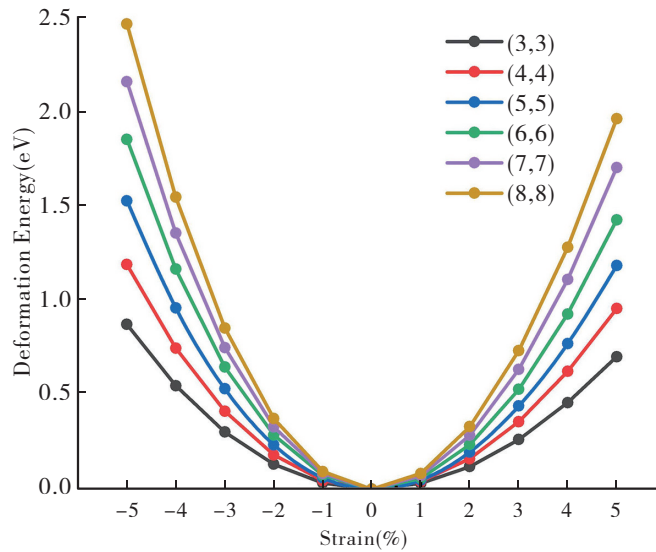


图3 压缩与拉伸下,6种扶手椅型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管的形变能
(注:未形变时能量设为零)

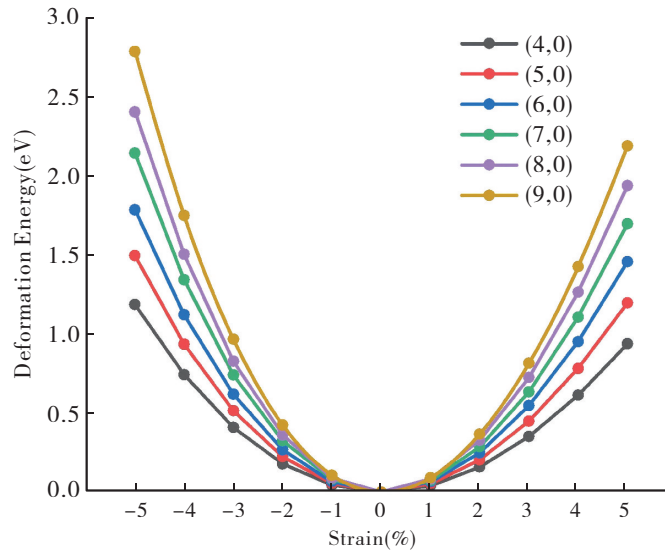


图4 压缩与拉伸下,6种锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管的形变能
(注:未形变时能量设为零)

型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管的电子和空穴有效质量的变化规律。图5(b)中扶手椅型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管中除(3,3)和(6,6),其余均发生电子的有效质量比空穴大的现象,此类波动可能与纳米管的曲率效应有关。

计算沿着周期方向施加单轴应力时,在0.01%的正应变范围内的能带结构,得到了两条与费米能级处能量变化相关系数 > 0.999 的直线,由直线斜率分别得到导带和价带的形变势常数 E_c 和 E_v 。图5(c)和图6(c)为扶手椅型和锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管导带和价带的形变势常数 E_c 和 E_v 。能够得出,扶手椅型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管VBM和CBM随着管径的增大,整体呈先增加后减少的趋势。锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管VBM在(6,0)急剧上升,随后下降并再次上升,而CBM变化较小,但仍有一定的峰值。这表明,整体结构的形变势常数随着管径变化而变化显著。

将计算得到的电子和空穴的有效质量 m_e^* 和 m_h^* 、弹性模量 C 以及导带和价带的形变势常数 E_c 和 E_v ,由此计算出的室温下(300 k)电子和空穴的迁移率 μ_e 和 μ_h 都列于表1、表2中。同样地,在图5(d)和图6(d)中可以看到扶手椅型和锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管电子和空穴的迁移率 μ_e 和 μ_h 随管径的变化。

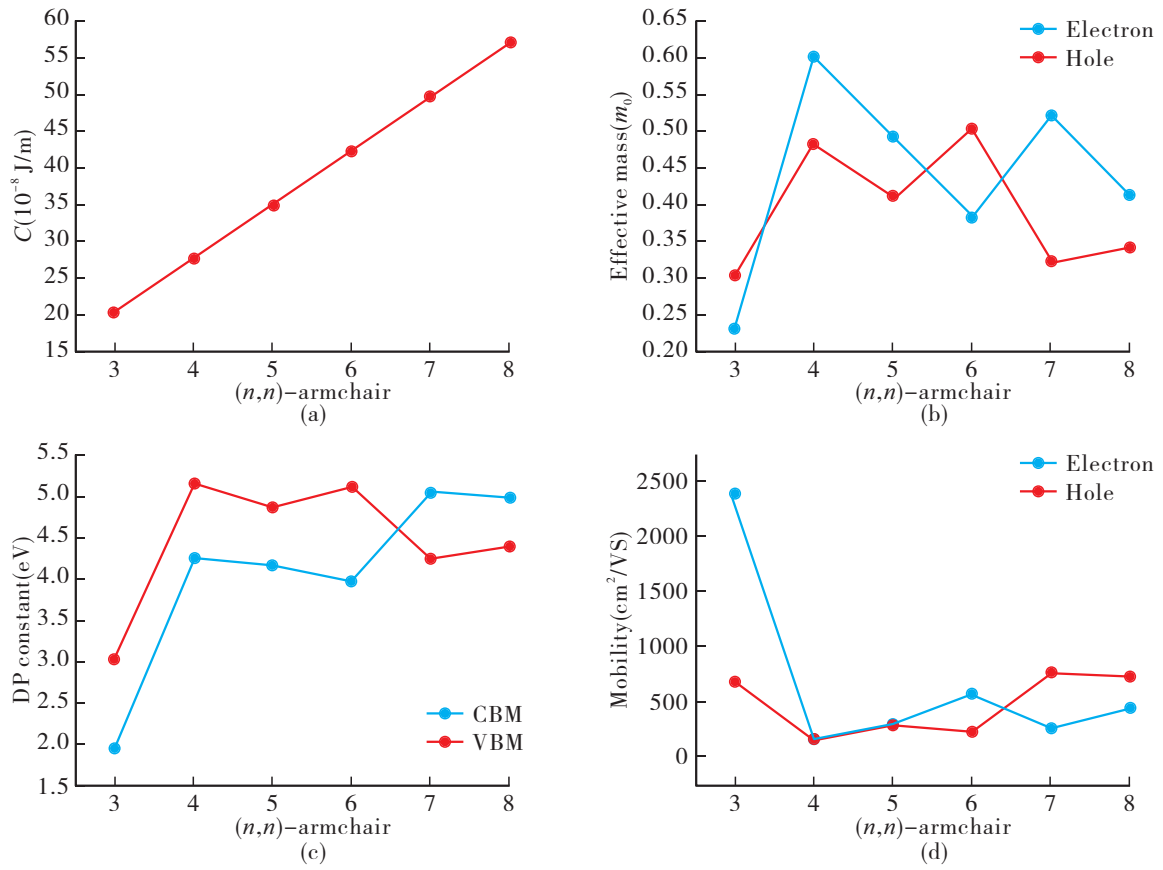


图5 六种扶手椅型 $C_{0.9}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管弹性模量 C (a)、电子和空穴的有效质量 m^* (b)、导带和价带的形变势常数 E_c 和 E_v (c) 以及电子和空穴的迁移率 μ_e 和 μ_h (d)

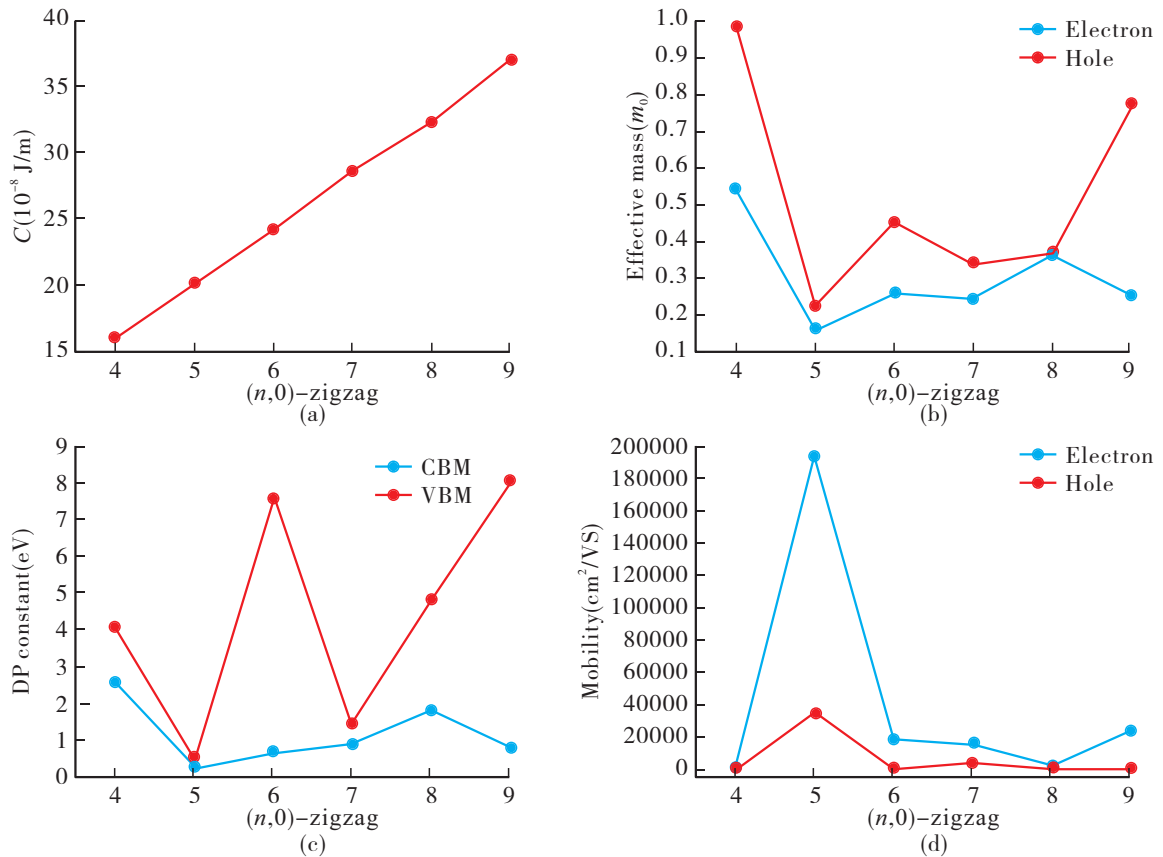


图6 六种锯齿型 $C_{0.9}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管弹性模量 C (a)、电子和空穴的有效质量 m^* (b)、导带和价带的形变势常数 E_c 和 E_v (c) 以及电子和空穴的迁移率 μ_e 和 μ_h (d)

表1 室温下(300 K),6种扶手椅型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管电子和空穴的有效质量 m_e^* 和 m_h^* 、弹性模量 C 、导带和价带的形变势常数 E_c 和 E_v 以及电子和空穴的迁移率 μ_e 和 μ_h

(n, n)	m_e^* (m_0)	m_h^* (m_0)	$C(10^{-8}J/m)$	$E_c(eV)$	$E_v(eV)$	$\mu_e(cm^2/Vs)$	$\mu_h(cm^2/Vs)$
33	0.23	0.30	20.17	1.93	3.00	2371	670
44	0.60	0.48	27.52	4.24	5.15	162	154
55	0.49	0.41	34.82	4.14	4.84	293	277
66	0.38	0.50	42.11	3.94	5.08	566	225
77	0.52	0.32	49.55	5.01	4.22	256	763
88	0.41	0.34	56.78	4.95	4.37	431	717

表2 室温下(300 K),6种锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管电子和空穴的有效质量 m_e^* 和 m_h^* 、弹性模量 C 、导带和价带的形变势常数 E_c 和 E_v 以及电子和空穴的迁移率 μ_e 和 μ_h

$(n, 0)$	m_e^* (m_0)	m_h^* (m_0)	$C(10^{-8}J/m)$	$E_c(eV)$	$E_v(eV)$	$\mu_e(cm^2/Vs)$	$\mu_h(cm^2/Vs)$
40	0.54	0.98	15.98	2.61	4.08	291	48
50	0.16	0.22	20.12	0.28	0.52	193414	35372
60	0.26	0.45	24.14	0.69	7.57	18194	68
70	0.24	0.34	28.58	0.88	1.42	15178	3524
80	0.36	0.37	32.27	1.83	4.82	2158	298
90	0.25	0.77	36.97	0.79	8.04	23840	42

从表1和表2可以看出, $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管的载流子迁移率表现出对手性结构和管径的强烈依赖性,这一现象源于其内在的电子结构和电-声子耦合机制的差异。

首先,从有效质量来看,扶手椅型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管中电子与空穴的有效质量整体分布在0.2~0.6 m_0 范围内,随管径变化较为平缓。这说明扶手椅型能带结构对几何尺寸的敏感性相对较低。然而在锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管中,电子有效质量的变化更为显著。例如,当(5,0)时, m_e^* 降至0.16 m_0 , 显著小于扶手椅型对应值。这种差异表明,锯齿型纳米管在特定手性下能够实现更强的能带色散效应,从而为高迁移率运输提供了可能。

其次,弹性模量 C 在两类纳米管中均随着管径的增加而单调上升。例如,在扶手椅型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管中, C 从 $20.17 \times 10^{-8} J/m$ 增至 $56.78 \times 10^{-8} J/m$, 在锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管中则由 $15.98 \times 10^{-8} J/m$ 增至 $36.97 \times 10^{-8} J/m$. 这说明无论手性如何,几何尺寸的增加均会增强纳米管的机械刚度,使其更具结构稳定性。

进一步对比形变势常数可以发现,扶手椅型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管的 E_c 和 E_v 基本稳定在4~5 eV 范围内,仅在小直径(3,3)时, E_c 显著降低至1.93 eV. 相比之下,锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管的形变势常数波动更大,例如,(5,0) E_c 和 E_v 分别降至0.28 eV 和0.52 eV,而在大直径(9,0)时则增至约9 eV. 这种强烈的波动说明,锯齿型纳米管对手性与管径的依赖性更强,其运输特性更易于通过结构调控实现优化。

在迁移率方面,扶手椅型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管中电子迁移率整体高于空穴迁移率。例如,(3,3)的电子迁移率可达 $2371 cm^2/Vs$, 而空穴仅为 $670 cm^2/Vs$. 这表明在扶手椅型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管中,电子主导的运输更具优势。但其整体迁移率水平仅在百至千量级,限制了其在高性能电子器件中的潜力。相比之下,锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管的迁移率在某些结构中可提升数个数量级。例如,(5,0)的空穴迁移率具有 $35372 cm^2/Vs$ 的最大值,电子迁移率具有 $193414 cm^2/Vs$ 的最大值,与单壁碳纳米管($120000 cm^2/Vs$)^[3]的数量级相同,如此巨大的提升主要源于其较小的有效质量和低形变势常数。这表明在适当的管径下,锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管能够远超扶手椅型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁的运输性能。需要指出的是,由于形变势理论未考虑光学声子散射、杂质散射等复杂运输机制,因此文章得到的迁移率应

被视为理论极限值或趋势性参考,而非对实验测量值的精确预测。

3 结论

文章通过第一性原理计算,结合形变势理论,对扶手椅型和锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管的载流子迁移率进行研究。研究表明,该类异质结单壁纳米管具有较为优越的电学性能,尤其在锯齿型单壁纳米管中,电子迁移率高达 $193414 \text{ cm}^2/\text{Vs}$,空穴迁移率达到 $35372 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 。在特定结构下计算得到的结果显示, $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管的载流子迁移率有望达到与高性能 CNTs 相当甚至略高的水平,显示出优异的输运潜力。这一结果表明,异质结纳米管通过适当的结构设计和尺寸调控可以显著提高载流子的迁移率,从而为新型纳米电子器件的设计提供重要的理论支持。

文章进一步分析揭示了管径、手性和形变势对迁移率具有显著影响,其中特定手性的锯齿型 $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管因具有较低的有效质量和形变势常数,表现出更强的载流子输运能力。此外,随着管径增大,纳米管的弹性模量升高,机械刚性增强,结构稳定性得到改善,为其在器件中的应用奠定了基础。

综上所述, $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ 异质结单壁纳米管展现出可调带隙和高迁移率等优异的电学特性,融合了碳管与氮化硼管的材料优势,在未来纳米电子器件中具有广阔的应用前景。本研究为基于低维异质结构的高性能电子器件的设计与实现提供了坚实的理论支撑。

参考文献:

- [1] TAO Z, ZHAO Y, WANG Y, et al. Recent Advances in Carbon Nanotube Technology: Bridging the Gap from Fundamental Science to Wide Applications[J]. C, 2024, 10(03):69.
- [2] CHAE S H, LEE Y H. Carbon Nanotubes and Graphene towards Soft Electronics[J]. Nano Convergence, 2014, 1(01):15.
- [3] DURKOP T, GETTY S A, COBAS E, et al. Extraordinary Mobility in Semiconducting Carbon Nanotubes[J]. Nano Letters, 2004, 4(01):35-39.
- [4] HUGHES K J, IYER K A, BIRD R E, et al. Review of Carbon Nanotube Research and Development: Materials and Emerging Applications[J]. ACS Applied Nano Materials, 2024, 7(16):18695-18713.
- [5] DHURANDHAR N, DWIVEDI P. A Review Article on Carbon Nanotube Field Effect Transistors Technology [J]. CSVTU Research Journal on Engineering and Technology, 2019, 8(01):56.
- [6] HILLS G, LAU C, WRIGHT A, et al. Modern Microprocessor Built from Complementary Carbon Nanotube Transistors[J]. Nature, 2019, 572(7771):595-602.
- [7] SI J, ZHANG P, ZHANG Z. Road Map for, and Technical Challenges of, Carbon-nanotube Integrated Circuit Technology [J]. National Science Review, 2024, 11(03):3.
- [8] GOLBERG D, BANDO Y, HUANG Y, et al. Boron Nitride Nanotubes and Nanosheets[J]. ACS nano, 2010, 4(06):2979-2993.
- [9] RADOSAVLJEVIC M, APPENZELLER J, DERYCKE V, et al. Electrical Properties and Transport in Boron Nitride Nanotubes[J]. Applied Physics Letters, 2003, 82(23):4131-4133.
- [10] ZHANG D, ZHANG S, YAPICI N, et al. Emerging Applications of Boron Nitride Nanotubes in Energy Harvesting, Electronics, and Biomedicine[J]. ACS Omega, 2021, 6(32):20722-20728.
- [11] XIANG R, INOUE T, ZHENG Y, et al. One-dimensional Van Der Waals Heterostructures [J]. Science, 2020, 367(6477):537-542.
- [12] CHERNOZATONSKII L A, GALPERN E G, STANKEVICH I V, et al. Nanotube C-BN Heterostructures: Electronic Properties[J]. Carbon, 1999, 37(01):117-121.
- [13] MIR S H, YADAV V K, SINGH J K. Recent Advances in the Carrier Mobility of Two-dimensional Materials: A Theoretical Perspective[J]. ACS Omega, 2020, 5(24):14203-14211.
- [14] LI Z, GRAZIOSI P, NEOPHYTOU N. Deformation Potential Extraction and Computationally Efficient Mobility Calculations in Silicon from First Principles[J]. Physical Review B, 2021, 104(19):195201.
- [15] JIN Y, WANG X, YAO M, et al. High-throughput Deformation Potential and Electrical Transport Calculations [J]. Npj Computational Materials, 2023, 9(01):190.
- [16] CHUNG Y K, LEE J, LEE W G, et al. Theoretical Study of Anisotropic Carrier Mobility for Two-dimensional Nb_2Se_9 Material[J]. ACS Omega, 2021, 6(40):26782-26790.
- [17] CHEN X, LU S, CHEN Q, et al. From Bulk Effective Mass to 2D Carrier Mobility Accurate Prediction via Adversarial Transfer Learning[J]. Nature Communications, 2024, 15(01):5391.

- [18] KLEINHERBERS E, STEGMANN T, SZPAK N. Electronic Transport in Bent Carbon Nanotubes [J]. *Physical Review B*, 2023, 107(19):195424.
- [19] MULLEN J T, BOULTON J A, PAN M, et al. Electronic Properties of C-BN/diamond Heterostructures for High-frequency High-power Applications [J]. *Diamond and Related Materials*, 2024, 14(03):110920.
- [20] LEE Y, CHOI U, KIM K, et al. Recent Progress in Realizing Novel One-dimensional Polymorphs via Nanotube Encapsulation [J]. *Nano Convergence*, 2024, 11(01):52.
- [21] YANAR N, YANG E, PARK H, et al. Boron Nitride Nanotube (BNNT) Membranes for Energy and Environmental Applications [J]. *Membranes*, 2020, 10(12):430.
- [22] KIM M, GOERZEN D, JENA P V, et al. Human and Environmental Safety of Carbon Nanotubes Across their Life Cycle [J]. *Nature Reviews Materials*, 2024, 9(01):63–81.
- [23] WALLER I. Dynamical Theory of Crystal Lattices by M. Born and K. Huang [J]. *Acta Crystallographica*, 1956, 9(10):837–838.
- [24] NI X. Non-metallic Doped Gec Monolayer: Tuning Electronic and Photo-electrocatalysis for Water Splitting [J]. *Frontiers in Chemistry*, 2024, 12(04):1425698.
- [25] ZHU F, ZOU Y, LU J, et al. The Structural Stability, Electronic Properties Regulation and Feasibility of Controllable Preparation of a $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ Heterojunction Single-walled Nanotube [J]. *Heliyon*, 2023, 9(09):15.
- [26] LISEMA L I, MADHUKU M, ERASMUS R, et al. Synthesis and Modification of Boron Nitride Nanotubes Using Ion Implantation [J]. *Heliyon*, 2024, 10(13):33568.
- [27] KRESSE G, FURTHMULLER J. Efficient Iterative Schemes for Ab Initio Total-energy Calculations Using a Plane-wave Basis Set [J]. *Physical Review B*, 1996, 54(16):11169.
- [28] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized Gradient Approximation Made Simple [J]. *Physical Review Letters*, 1996, 77(18):3865.
- [29] BARDEEN J, SHOCKLEY W. Deformation Potentials and Mobilities in Non-polar Crystals [J]. *Physical Review*, 1950, 80(01):72.
- [30] BELEZNAY F B, BOGAR F, LADIK J. Charge Carrier Mobility in Quasi-one-dimensional Systems: Application to a Guanine Stack [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2003, 119(11):5690–5695.
- [31] LONG M Q, TANG L, WANG D, et al. Theoretical Predictions of Size-dependent Carrier Mobility and Polarity in Graphene [J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2009, 131(49):17728–17729.

First-principles Study of Carrier Mobility in Armchair and Zigzag $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ Heterojunction Single-walled Nanotubes

LI Xin-yi, GUO Yu-ru, LU Jun-zhe*

(Xinjiang Key Laboratory of Luminescence Minerals and Functional Materials, School of Physics and Electronic Engineering, Xinjiang Normal University, Urumqi, Xinjiang, 830054, China)

Abstract: This work investigates the carrier mobility of armchair ($n = 3-8$) and zigzag ($n = 4-9$) $C_{0.5}/(BN)_{0.5}$ heterojunction single-walled nanotubes based on density functional theory combined with deformation potential theory. Key transport-related parameters, including elastic modulus, carrier effective mass, and deformation potential constant, are systematically evaluated to uncover the effects of tube diameter and chirality on charge transport. Research results showed that, the calculated elastic modulus spans $15.98-56.78 \times 10^{-8}$ J/m, with tunable effective masses in the range of $0.16-0.98 m_0$, accompanied by pronounced variations in deformation potential constants ($0.28-8.04$ eV). Mobility analysis reveals a pronounced diameter dependence: the zigzag (5, 0) nanotube achieves the highest electron and hole mobilities of $193414 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ and $35372 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, respectively. In the armchair family, (3, 3) and (8, 8) nanotubes exhibit superior electron ($2371 \text{ cm}^2/\text{Vs}$) and hole ($717 \text{ cm}^2/\text{Vs}$) mobilities. Through a comprehensive comparison of 12 chiral configurations, results demonstrate that C/BN heterojunctions enable cooperative bandgap engineering and high-mobility charge transport, offering both theoretical insight and promising material platforms for next-generation high-performance nanoelectronic devices.

Keywords: Heterojunction nanotubes; Carrier mobility; Deformation potential theory; First-principles calculations