

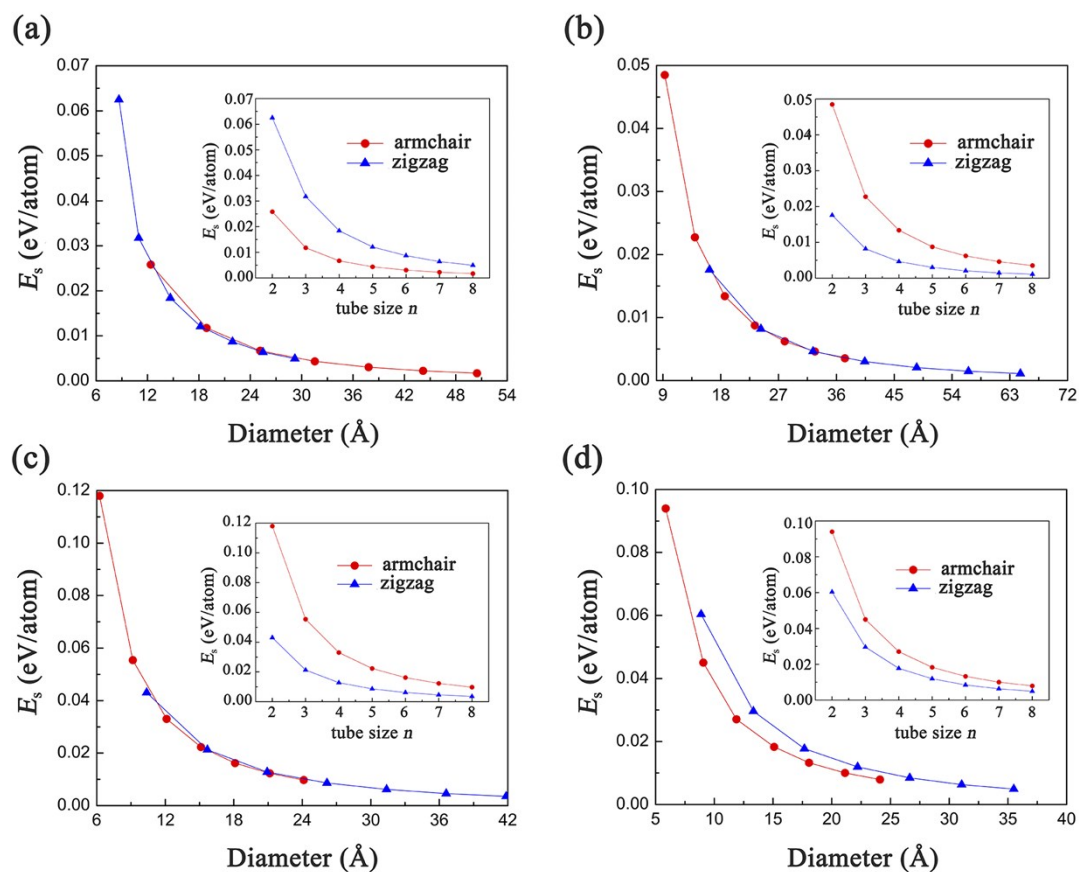


Fig. S1 Strain energies of (a) α -GDYNTs, (b) β -GDYNTs, (c) γ -GDYNTs and (d) 6,6,18-GDYNTs as a function of tube diameter.

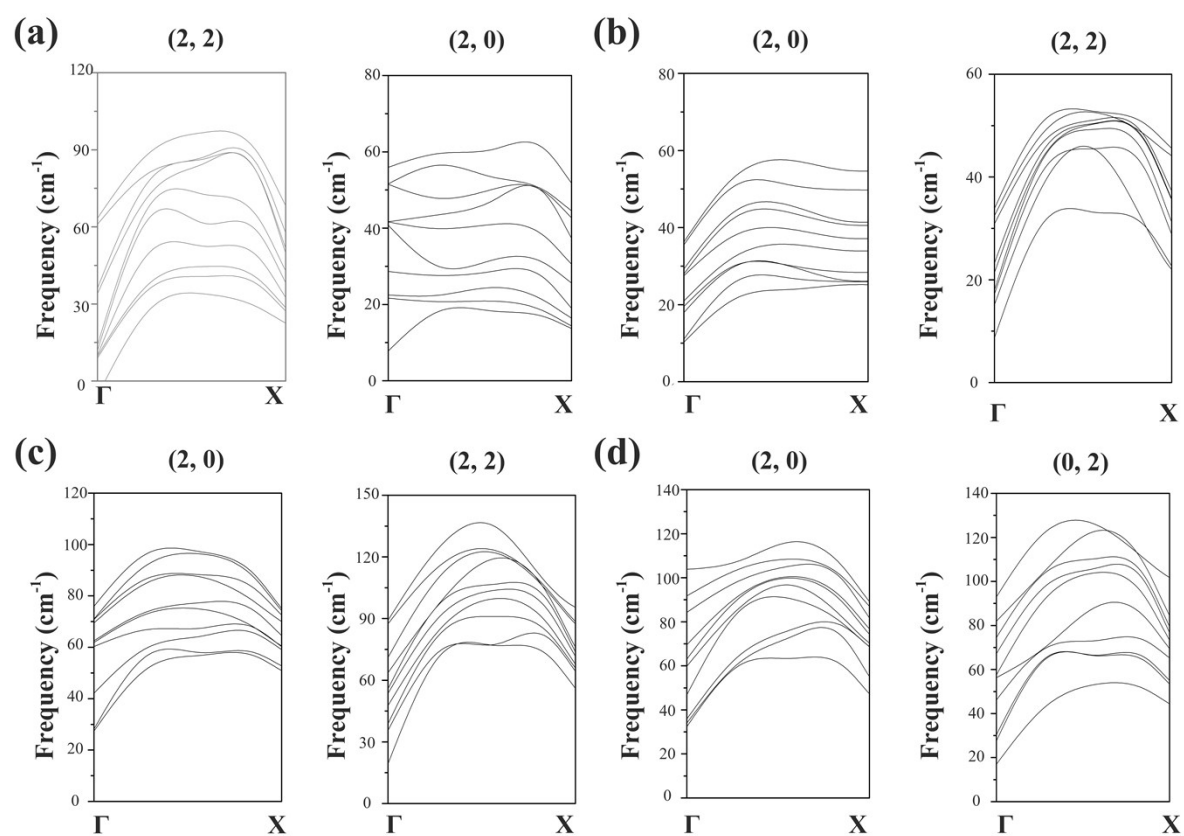
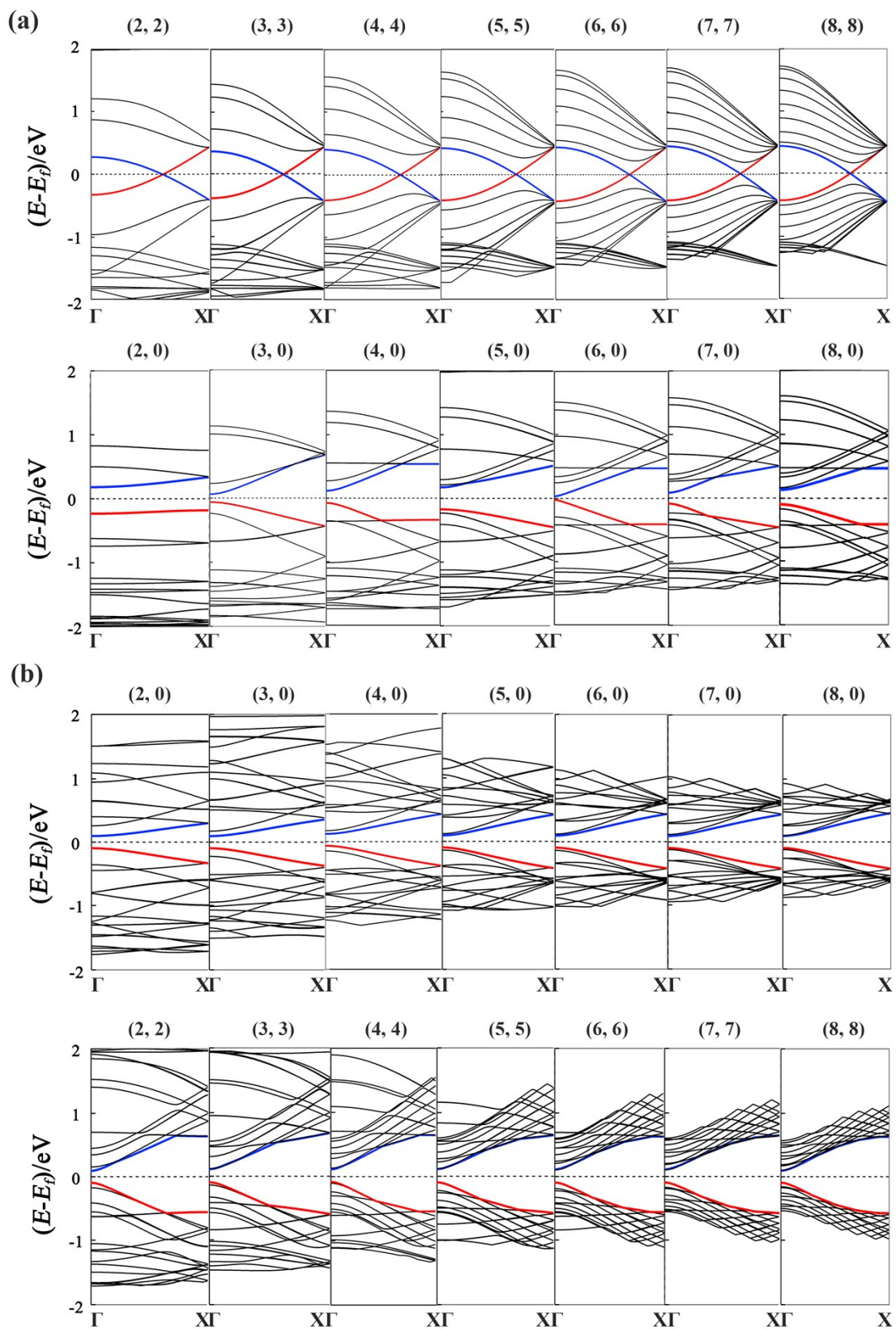


Fig. S2 Phonon dispersions of (a) α -GDYNTs, (b) β -GDYNTs, (c) γ -GDYNTs and (d) 6,6,18-GDYNTs with $n=2$.



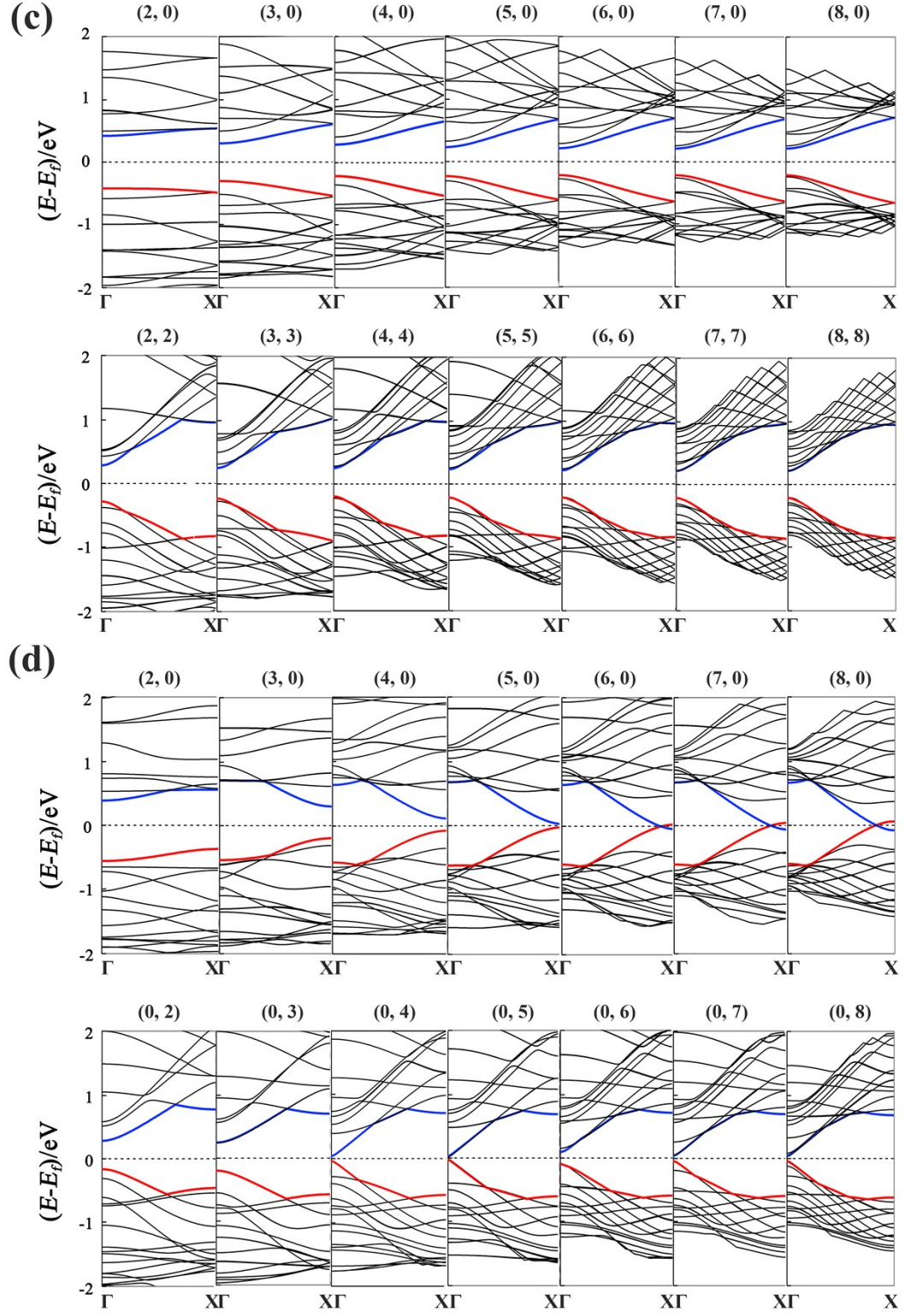


Fig. S3 Band structures of (a) α -GDYNTs, (b) β -GDYNTs, (c) γ -GDYNTs and (d) 6,6,18-GDYNTs.

Table S1 The calculated lattice parameter ($\text{\AA}$), stretching moduli ($\text{eV \AA}^{-1}$), the DP constants (eV), effective mass (m_e) and mobilities ($\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$) for GDYNTs at $T=298\text{K}$.

GDYNTs	a_0	C	E_{Iv}	E_{Ic}	m_h^*	m_e^*	μ_h	μ_e
α -NTs	(2, 2)	11.52	224.81	2.19		0.11		1.07×10^4
	(3, 3)	11.48	353.71	2.15		0.11		1.95×10^4
	(4, 4)	11.47	465.57	2.04		0.11		2.32×10^4
	(5, 5)	11.47	577.56	1.94		0.12		3.10×10^4
	(6, 6)	11.46	702.29	2.09		0.13		2.64×10^4
	(7, 7)	11.46	839.02	2.34		0.11		3.53×10^4
	(8, 8)	11.46	946.77	2.14		0.11		4.46×10^4
	(2, 0)	19.81	135.94	1.18	3.77	0.81	0.57	1.06×10^3
	(3, 0)	20.06	172.78	1.22	1.91	0.11	0.06	2.65×10^4
	(4, 0)	19.97	277.16	2.98	1.47	0.06	0.06	1.55×10^4
	(5, 0)	19.94	342.54	1.08	1.57	0.16	0.07	3.57×10^4
	(6, 0)	19.91	402.30	1.24	3.00	0.11	0.10	5.92×10^4
	(7, 0)	19.89	466.19	2.97	1.35	0.06	0.06	2.66×10^4
	(8, 0)	19.88	540.89	1.15	3.03	0.09	0.08	1.24×10^5
	(2, 0)	25.62	202.45	0.74	3.65	0.13	0.16	6.28×10^4
	(3, 0)	25.46	277.28	0.66	3.43	0.08	0.10	2.14×10^5
β -NTs	(4, 0)	25.41	317.46	0.63	3.35	0.07	0.07	3.36×10^5
	(5, 0)	25.40	385.70	0.61	3.31	0.07	0.07	4.26×10^5
	(6, 0)	25.39	417.16	0.60	3.29	0.06	0.07	5.75×10^5
	(7, 0)	25.39	579.91	0.60	3.29	0.07	0.06	7.26×10^5
	(8, 0)	25.39	703.67	0.60	3.28	0.07	0.06	9.14×10^5
	(2, 2)	14.67	388.99	3.56	0.85	0.09	0.08	8.41×10^3
	(3, 3)	14.66	425.51	3.57	0.83	0.09	0.10	9.57×10^3
	(4, 4)	14.66	537.19	3.57	0.83	0.09	0.11	1.25×10^4
	(5, 5)	14.66	626.15	3.58	0.83	0.09	0.11	1.40×10^4
	(6, 6)	14.66	751.19	3.58	0.83	0.09	0.10	1.60×10^4
	(7, 7)	14.66	865.41	3.58	0.83	0.10	0.10	1.71×10^4
	(8, 8)	14.66	988.48	3.45	0.83	0.10	0.09	2.02×10^4
	(2, 0)	16.72	319.26	0.80	4.98	2.65	0.40	9.11×10^2
	(3, 0)	16.53	398.95	0.64	4.60	0.37	0.19	3.50×10^4
	(4, 0)	16.47	471.40	0.57	4.45	0.17	0.14	1.58×10^5
	(5, 0)	16.45	640.47	0.55	4.40	0.15	0.13	2.99×10^5
	(6, 0)	16.43	851.28	0.53	4.36	0.14	0.12	4.65×10^5

γ -NTs	(7, 0)	16.43	908.45	0.52	4.35	0.12	0.11	6.57×10^5	1.02×10^4
	(8, 0)	16.42	973.46	0.53	4.34	0.11	0.09	7.66×10^5	1.42×10^4
	(2, 2)	9.48	351.34	4.82	0.25	0.13	0.12	2.52×10^3	1.11×10^6
	(3, 3)	9.48	557.18	4.81	0.18	0.10	0.12	6.01×10^3	3.45×10^6
	(4, 4)	9.48	742.54	4.81	0.17	0.09	0.09	9.05×10^3	8.43×10^6
	(5, 5)	9.48	917.00	4.65	0.17	0.09	0.08	1.30×10^4	1.11×10^7
	(6, 6)	9.48	1008.73	4.71	0.18	0.08	0.08	1.48×10^4	1.21×10^7
	(7, 7)	9.48	1353.88	4.84	0.18	0.09	0.07	1.68×10^4	1.74×10^7
	(8, 8)	9.48	1567.87	4.84	0.18	0.08	0.07	2.20×10^4	1.92×10^7
6,6,18 -NTs	(2, 0)	14.38	280.07	0.49	3.57	0.37	0.33	4.17×10^4	9.13×10^2
	(3, 0)	14.08	386.44	4.83	0.36	0.18	0.11	1.67×10^3	6.04×10^5
	(4, 0)	14.00	474.34	4.89	0.16	0.14	0.13	3.17×10^3	3.20×10^6
	(5, 0)	13.97	653.35	4.92	0.07	0.12	0.10	5.27×10^3	3.34×10^7
	(6, 0)	13.95	803.13		2.33		0.10		3.70×10^4
	(7, 0)	13.94	904.98		2.65		0.11		2.66×10^4
	(8, 0)	13.93	1070.02		2.61		0.12		2.84×10^4
	(0, 2)	9.49	203.73	0.29	3.82	0.22	0.19	1.94×10^5	1.39×10^3
	(0, 3)	9.49	313.53	0.37	3.83	0.21	0.19	1.89×10^5	2.07×10^3
	(0, 4)	9.48	470.84	3.71	0.14	0.18	0.19	3.48×10^3	2.44×10^6
	(0, 5)	9.48	642.30	0.21	3.78	0.22	0.22	1.13×10^6	3.47×10^3
	(0, 6)	9.48	868.41	3.70	0.13	0.24	0.15	4.29×10^3	6.52×10^6
	(0, 7)	9.48	943.81	3.74	0.18	0.27	0.23	3.86×10^3	2.04×10^6
	(0, 8)	9.48	1097.49	0.27	3.80	0.22	0.20	1.17×10^6	6.58×10^3
