МАТЕМАТИКА 2016. Т. 26. Вып. 2

УДК 517.958, 530.145.6

© *Л. Е. Морозова*

РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНА НА ПРИМЕСИ В УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКЕ

Углеродные нанотрубки активно исследуются в физической литературе в последние два десятилетия. Уникальные физические свойства, в частности высокая прочность и проводимость, обуславливают многообещающие возможности их применения в микроэлектронике. Несмотря на физическую актуальность этих задач, математически такие структуры исследовались очень мало. В данной работе в приближении сильной связи рассматривается гамильтониан электрона в однослойной нанотрубке типа «зигзаг» с примесью, равномерно распределенной в сечении нанотрубки. С помощью уравнения Липпмана–Швингера исследуется задача рассеяния для данного гамильтониана в случае малого потенциала примеси и медленных электронов. Поскольку электронная проводимость пропорциональна вероятности прохождения, фактически при этом изучается задача проводимости в нанотрубке. Получены простые формулы для коэффициентов отражения и прохождения. Найдены условия полного отражения и полного прохождения, а также условия возрастания и убывания вероятности прохождения.

Ключевые слова: углеродная нанотрубка, уравнение Липпмана–Швингера, рассеяние, вероятности прохождения и отражения.

DOI: 10.20537/vm160210

Углеродные нанотрубки активно исследуются в физической литературе (см., например, [1–3]) в последние два десятилетия. Уникальные физические свойства, в частности высокая прочность и проводимость, обуславливают многообещающие возможности их применения в микроэлектронике. В настоящей работе рассматривается гамильтониан электрона в однослойной нанотрубке типа «зигзаг» в приближении сильной связи. Этот гамильтониан можно получить, рассматривая одноэлектронный оператор Шрёдингера в приближении сильной связи в полосе графена с периодическими граничными условиями, отвечающими сворачиванию полосы в трубку. При этом вводятся две подрешетки, на которые естественным образом распадается решетка атомов графена: атом каждой из подрешеток окружен только атомами другой подрешетки. Волновая функция

$$\psi(n,m) = \begin{pmatrix} \psi_1(n,m) \\ \psi_2(n,m) \end{pmatrix}$$

электрона определена на узлах решетки, индекс (n,m) нумерует пары соседних атомов из разных подрешеток. Предполагаем, что амплитуда перескока электрона на соседний атом равна единице. Согласно [1, 2] соответствующий гамильтониан имеет вид

$$(H_0\psi)(n,m) = \begin{pmatrix} \psi_2(n,m) + \psi_2(n-1,m) + \psi_2(n,m-1) \\ \psi_1(n,m) + \psi_1(n+1,m) + \psi_1(n,m+1) \end{pmatrix}.$$

Оператор H_0 действует в подпространстве гильбертова пространства $(l^2(\Omega))^2$, где $\Omega = \mathbb{Z}\times \times\{0,1,\ldots,N-1\}$, $N \geqslant 2$. При этом функции ψ из области определения оператора H_0 должны удовлетворять периодическим граничным условиям $\psi|_{m=0} = \psi|_{m=N}$.

Положим $H_\varepsilon = H_0 + \varepsilon V$, где $\varepsilon > 0$. Оператор εV (потенциал, моделирующий влияние примеси, в отличие от [4], равномерно распределенной в сечении нанотрубки) действует по формуле

$$(\varepsilon V\psi)(n) = \varepsilon(\delta_{n0} + \delta_{nn_0})\begin{pmatrix} \psi_1(n) \\ \psi_2(n) \end{pmatrix}, \tag{1}$$

где δ_{n0} — символ Кронекера, $n_0 > 0$.

Далее через $R_0(\lambda)$ будем обозначать резольвенту оператора H_0, а через $\sigma(B)$ и $\sigma_{\text{ess}}(B)$ — спектр и существенный спектр оператора B соответственно. В работе [5] было доказано, что $\sigma(H_0) = [-3, -a] \cup [a, 3]$, где

$$a = \min_{l:\cos\frac{\pi l}{N}\geqslant 0}|2\cos\frac{\pi l}{N} - 1|.$$

В данной статье исследуется с помощью уравнения Липпмана–Швингера задача рассеяния электрона на примеси в углеродной нанотрубке. Поскольку в случае баллистического транспорта кондактанс (проводимость) может быть выражен через вероятность прохождения [6], фактически при этом изучается задача проводимости в углеродной нанотрубке. Получены простые формулы для коэффициентов отражения и прохождения в случае малой скорости движения электрона и малого потенциала. Найдены условия полного отражения и полного прохождения, а также условия возрастания и убывания вероятности прохождения.

Для исследования задачи рассеяния рассмотрим уравнение Липпмана–Швингера

$$\psi(n) = \psi_0(n) - (R_0(\lambda)V\psi)(n), \quad n \in \mathbb{Z}, \tag{2}$$

где функция $\psi_0(n)$ удовлетворяет уравнению $(H_0 - \lambda)\psi_0 = 0$. Здесь λ принадлежит внутренности существенного спектра оператора H (заметим, что оператор $VR_0(\lambda)$, где $\lambda \in \sigma(H_0)$, компактен и, следовательно, $\sigma_{\text{ess}}(H) = \sigma(H_0)$). В работе [5] было доказано, что резольвента $R_0(\lambda)$ оператора H_0 имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}(R_0(\lambda)\psi)_{1l}(n) &= \frac{1}{4i\cos\frac{\pi l}{N}\sin k_l}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}\Big(e^{ik_l|n-n'|}e^{-\frac{i\pi l(n-n')}{N}}(\lambda\psi_{1l}(n') + \\ &\quad + (1+e^{\frac{2\pi il}{N}})\psi_{2l}(n')) + e^{ik_l|n-n'-1|}e^{-\frac{i\pi l(n-n'-1)}{N}}\psi_{2l}(n')\Big), \\ (R_0(\lambda)\psi)_{2l}(n) &= \frac{1}{4i\cos\frac{\pi l}{N}\sin k_l}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}\Big(e^{ik_l|n-n'|}e^{-\frac{i\pi l(n-n')}{N}}(\lambda\psi_{2l}(n') + \\ &\quad + (1+e^{-\frac{2\pi il}{N}})\psi_{1l}(n')) + e^{ik_l|n-n'+1|}e^{-\frac{i\pi l(n-n'+1)}{N}}\varphi_{1l}(n')\Big).\end{aligned} \tag{3}$$

Здесь $\sin k_l = -\sqrt{1-\cos^2 k_l}$, $\cos k_l = \dfrac{\lambda^2 - 3 - 2\cos\frac{2\pi l}{N}}{4\cos\frac{\pi l}{N}}$. Функция $\psi_0(n)$ (записанная для переменной k_l) имеет вид (см. [4])

$$\psi_0(n) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\begin{array}{c} 1 \\ \frac{\sqrt{3+2\left(\cos(k_l-\pi l/N)+\cos(2\pi l/N)+\cos(k_l+\pi l/N)\right)}}{1+e^{-i(k_l-\pi l/N)}+e^{i2\pi l/N}}\end{array}\right)e^{i(k_l-\pi l/N)n} \tag{4}$$

Обозначим

$$D(k_l) = \frac{\sqrt{3+2(\cos(k_l-\pi l/N)+\cos(2\pi l/N)+\cos(k_l+\pi l/N))}}{1+e^{-i(k_l-\pi l/N)}+e^{i2\pi l/N}}.$$

Уравнение (2) в соответствии с (3) и (4) принимает вид

$$\begin{aligned}\psi_{1l}(n) &= \frac{e^{i(k_l-\frac{\pi l}{N})n}}{\sqrt{2}} - \frac{1}{4i\sin k_l\cos\frac{\pi l}{N}}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}\Big[e^{ik_l|n-n'|}e^{-\frac{i\pi l(n-n')}{N}}\big(\lambda(V\psi)_{1l}(n') + \\ &\quad + (1+e^{\frac{2\pi il}{N}})(V\psi)_{2l}(n')\big) + e^{ik_l|n-n'-1|}e^{-\frac{i\pi l(n-n'-1)}{N}}(V\psi)_{2l}(n')\Big], \\ \psi_{2l}(n) &= \frac{D(k_l)}{\sqrt{2}} - \frac{1}{4i\sin k_l\cos\frac{\pi l}{N}}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}\Big[e^{ik_l|n-n'|}e^{-\frac{i\pi l(n-n')}{N}}\big(\lambda(V\psi)_{2l}(n') + \\ &\quad + (1+e^{-\frac{2\pi il}{N}})V(n')\psi_{1l}(n')\big) + e^{ik_l|n-n'+1|}e^{-\frac{i\pi l(n-n'+1)}{N}}(V\psi)_{1l}(n')\Big], \quad n\in\mathbb{Z}.\end{aligned} \tag{5}$$

Запишем уравнения (5) для $n \geqslant n_0$ в виде

$$\begin{aligned} \psi_{1l}(n) &= e^{ik_l n} e^{-\frac{i\pi ln}{N}} \Big(\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{4i \sin k_l \cos\frac{\pi l}{N}} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} \Big[e^{-ik_l n'} e^{\frac{i\pi l n'}{N}} \big(\lambda (V\psi)_{1l}(n') + \\ &\quad + (1 + e^{\frac{2\pi i l}{N}})(V\psi)_{2l}(n') + e^{-ik_l} e^{\frac{i\pi l}{N}} (V\psi)_{2l}(n') \big) \Big] \Big), \\ \psi_{2l}(n) &= e^{ik_l n} e^{-\frac{i\pi ln}{N}} \Big(\frac{D(k_l)}{\sqrt{2}} - \frac{1}{4i \sin k_l \cos\frac{\pi l}{N}} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} \Big[e^{-ik_l n'} e^{\frac{i\pi l n'}{N}} \big(\lambda (V\psi)_{2l}(n') + \\ &\quad + (1 + e^{\frac{-2\pi i l}{N}})(V\psi)_{1l}(n') + e^{ik_l} e^{\frac{-i\pi l}{N}} (V\psi)_{1l}(n') \big) \Big] \Big). \end{aligned} \tag{6}$$

Обозначим через a_{1l}^{+} и a_{2l}^{+} коэффициенты прохождения для первой и второй псевдоспиновой компоненты соответственно. Из уравнений (6) эти коэффициенты легко находятся. Имеем

$$\begin{aligned} a_{1l}^{+} &= \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{4i \sin k_l \cos\frac{\pi l}{n}} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} \Big[e^{-ik_l n'} e^{\frac{i\pi l n'}{N}} \big(\lambda (V\psi)_{1l}(n') + \\ &\quad + (1 + e^{\frac{2\pi i l}{N}})(V\psi)_{2l}(n') + e^{-ik_l} e^{\frac{i\pi l}{N}} (V\psi)_{2l}(n') \big) \Big], \\ a_{2l}^{+} &= \frac{D(k_l)}{\sqrt{2}} - \frac{1}{4i \sin k_l \cos\frac{\pi l}{N}} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} \Big[e^{-ik_l n'} e^{\frac{i\pi l n'}{N}} \big(\lambda (V\psi)_{2l}(n') + \\ &\quad + (1 + e^{\frac{-2\pi i l}{N}})(V\psi)_{1l}(n') + e^{ik_l} e^{\frac{-i\pi l}{N}} (V\psi)_{1l}(n') \big) \Big]. \end{aligned}$$

Учитывая (1), получаем

$$\begin{aligned} a_{1l}^{+} &= \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{\varepsilon}{4i \sin k_l \cos\frac{\pi l}{N}} \Big[\lambda \big(\psi_{1l}(0) + e^{-ik_l n_0} e^{\frac{i\pi l n_0}{N}} \psi_{1l}(n_0) \big) + \\ &\quad + (1 + e^{\frac{2\pi i l}{N}} + e^{-ik_l} e^{\frac{i\pi l}{N}}) \big(\psi_{2l}(0) + \psi_{2l}(n_0) e^{-ik_l n_0} e^{\frac{i\pi l n_0}{N}} \big) \Big], \\ a_{2l}^{+} &= \frac{D(k_l)}{\sqrt{2}} - \frac{\varepsilon}{4i \sin k_l \cos\frac{\pi l}{N}} \Big[\lambda \big(\psi_{2l}(0) + e^{-ik_l n_0} e^{\frac{i\pi l n_0}{N}} \psi_{2l}(n_0) \big) + \\ &\quad + (1 + e^{-\frac{2\pi i l}{N}} + e^{ik_l} e^{\frac{-i\pi l}{N}}) \big(\psi_{1l}(0) + \psi_{1l}(n_0) e^{-ik_l n_0} e^{\frac{i\pi l n_0}{N}} \big) \Big]. \end{aligned}$$

Из полученных формул и (6) для $n \geqslant n_0$ следуют равенства

$$\psi_{1l}(n) = e^{ik_l n} e^{-\frac{i\pi ln}{N}} a_{1l}^{+}, \qquad \psi_{2l}(n) = e^{ik_l n} e^{-\frac{i\pi ln}{N}} a_{2l}^{+}. \tag{7}$$

Аналогично для $n \leqslant 0$ запишем уравнения (5) в виде

$$\begin{aligned} \psi_{1l}(n) &= e^{-\frac{i\pi ln}{N}} \Big(\frac{e^{ik_l n}}{\sqrt{2}} - \frac{e^{-ik_l n}}{4i \sin k_l \cos\frac{\pi l}{N}} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} \Big[e^{ik_l n'} e^{\frac{i\pi l n'}{N}} \big(\lambda (V\psi)_{1l}(n') + \\ &\quad + (1 + e^{\frac{2\pi i l}{N}})(V\psi)_{2l}(n') + e^{ik_l} e^{\frac{i\pi l}{N}} (V\psi)_{2l}(n') \big) \Big] \Big), \\ \psi_{2l}(n) &= e^{-\frac{i\pi ln}{N}} \Big(\frac{e^{ik_l n} D(k_l)}{\sqrt{2}} - \frac{e^{-ik_l n}}{4i \sin k_l \cos\frac{\pi l}{N}} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} \Big[e^{ik_l n'} e^{\frac{i\pi l n'}{N}} \big(\lambda (V\psi)_{2l}(n') + \\ &\quad + (1 + e^{\frac{-2\pi i l}{N}})(V\psi)_{1l}(n') + e^{-ik_l} e^{\frac{-i\pi l}{N}} (V\psi)_{1l}(n') \big) \Big] \Big). \end{aligned} \tag{8}$$

Обозначая через a_{1l}^{-} и a_{2l}^{-} коэффициенты отражения для первой и второй псевдоспиновой компоненты соответственно, запишем для них выражения

$$a_{1l}^{-} = -\frac{1}{4i \sin k_l \cos\frac{\pi l}{n}} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} \Big[e^{ik_l n'} e^{\frac{i\pi l n'}{N}} \big(\lambda (V\psi)_{1l}(n') + (1 + e^{\frac{2\pi i l}{N}}) V(n') \psi_{2l}(n') + e^{ik_l} e^{\frac{i\pi l}{N}} (V\psi)_{2l}(n') \big) \Big],$$

$$a_{2l}^{-} = -\frac{1}{4i \sin k_l \cos\frac{\pi l}{n}} \sum_{n'\in\mathbb{Z}} \Big[e^{ik_l n'} e^{\frac{i\pi l n'}{N}} \big(\lambda (V\psi)_{2l}(n') + (1 + e^{\frac{-2\pi i l}{N}}) (V\psi)_{1l}(n') + e^{-ik_l} e^{\frac{-i\pi l}{N}} (V\psi)_{1l}(n') \big) \Big].$$

Учитывая (1), имеем

$$a_{1l}^{-}=-\frac{\varepsilon}{4i\sin k_l\cos\frac{\pi l}{N}}\Big[\lambda\big(\psi_{1l}(0)+e^{ik_ln_0}e^{\frac{i\pi ln_0}{N}}\psi_{1l}(n_0)\big)+$$
$$+\big(1+e^{\frac{2\pi il}{N}}+e^{ik_l}e^{\frac{i\pi l}{N}}\big)\big(\psi_{2l}(0)+\psi_{2l}(n_0)e^{ik_ln_0}e^{\frac{i\pi ln_0}{N}}\big)\Big],$$
$$a_{2l}^{-}=-\frac{\varepsilon}{4i\sin k_l\cos\frac{\pi l}{n}}\Big[\lambda\big(\psi_{2l}(0)+e^{ik_ln_0}e^{\frac{i\pi ln_0}{N}}\psi_{2l}(n_0)\big)+$$
$$+(1+e^{\frac{-2\pi il}{N}}+e^{-ik_l}e^{-\frac{i\pi l}{N}})\big(\psi_{1l}(0)+\psi_{1l}(n_0)e^{ik_ln_0}e^{\frac{i\pi ln_0}{N}}\big)\Big],$$

тогда отсюда и из (8) для $n\leqslant 0$ получим

$$\psi_{1l}(n)=e^{-\frac{i\pi ln}{N}}\Big(\frac{e^{ik_ln}}{\sqrt2}+e^{-ik_ln}a_{1l}^{-}\Big),\qquad \psi_{2l}(n)=e^{-\frac{i\pi ln}{N}}\Big(\frac{e^{ik_ln}D(k_l)}{\sqrt2}+e^{-ik_ln}a_{2l}^{-}\Big).\tag{9}$$

Далее считаем, что $k_l=A\varepsilon$, $A\neq0$ — вещественная константа. Если ε мало (при этом $k_l\approx0$, то есть скорость движения электрона мала), то

$$e^{ik_ln}=1+O(\varepsilon),\quad \sin k_l=A\varepsilon+O(\varepsilon^3)=\varepsilon A(1+O(\varepsilon^2)).$$

Предполагая, что $2\cos\frac{\pi l}{N}+1>0$, после несложных преобразований имеем

$$D(k_l)=e^{-i\pi l/N}+O(\varepsilon),\qquad \lambda=2\cos\frac{\pi l}{N}+1+O(\varepsilon^2).\tag{10}$$

Для $n=n_0$ из (7) следует, что $\psi_{1l}(n_0)=a_{1l}^{+}e^{-\frac{i\pi ln_0}{N}}+O(\varepsilon)$, $\quad\psi_{2l}(n_0)=a_{2l}^{+}e^{-\frac{i\pi ln_0}{N}}+O(\varepsilon)$. Отсюда для амплитуд прохождения получаем следующие формулы:

$$a_{1l}^{+}=e^{\frac{i\pi ln_0}{N}}\psi_{1l}(n_0)+O(\varepsilon),\qquad a_{2l}^{+}=e^{\frac{i\pi ln_0}{N}}\psi_{2l}(n_0)+O(\varepsilon).$$

Для $n=0$ из уравнений (9) следует, что $\psi_{1l}(0)=\dfrac{1}{\sqrt2}+a_{1l}^{-}$, $\quad\psi_{2l}(0)=\dfrac{e^{\frac{-i\pi l}{N}}}{\sqrt2}+a_{2l}^{-}$, откуда амплитуды отражения a_{jl}^{-}, $(j=1,2)$ определяются формулами

$$a_{1l}^{-}=\psi_{1l}(0)-\frac{1}{\sqrt2},\qquad a_{2l}^{-}=\psi_{2l}(0)-\frac{e^{\frac{-i\pi l}{N}}}{\sqrt2}.$$

Из (6) и (8) получаем систему относительно чисел $\psi_{1l}(0)$, $\psi_{1l}(n_0)$, $\psi_{2l}(0)$, $\psi_{2l}(n_0)$:

$$\begin{cases} b_1\psi_{1l}(0)+c_1\psi_{1l}(n_0)+d_1\psi_{2l}(0)+f_1\psi_{2l}(n_0)=g_1,\\ b_2\psi_{1l}(0)+b_1\psi_{1l}(n_0)+d_2\psi_{2l}(0)+d_1\psi_{2l}(n_0)=g_2,\\ b_3\psi_{1l}(0)+c_2\psi_{1l}(n_0)+b_1\psi_{2l}(0)+f_2\psi_{2l}(n_0)=g_3,\\ b_4\psi_{1l}(0)+b_3\psi_{1l}(n_0)+b_2\psi_{2l}(0)+b_1\psi_{2l}(n_0)=g_4.\end{cases}$$

Здесь

$$d_1=\frac{(2\cos\frac{\pi l}{N}+1)e^{\frac{i\pi l}{N}}}{4iA\cos\frac{\pi l}{N}},\quad d_2=\frac{(2\cos\frac{\pi l}{N}+1)e^{\frac{i\pi l}{N}(1-n_0)}}{4iA\cos\frac{\pi l}{N}},$$

$$b_1=1+\frac{\lambda}{4iA\cos\frac{\pi l}{N}},\quad b_2=\frac{\lambda e^{-\frac{i\pi ln_0}{N}}}{4iA\cos\frac{\pi l}{N}},\quad b_3=\frac{(2\cos\frac{\pi l}{N}+1)e^{-\frac{i\pi l}{N}}}{4iA\cos\frac{\pi l}{N}},$$

$$b_4=\frac{(2\cos\frac{\pi l}{N}+1)e^{-\frac{i\pi l}{N}(n_0+1)}}{4iA\cos\frac{\pi l}{N}},\quad c_1=\frac{\lambda e^{\frac{i\pi l}{N}}}{4iA\cos\frac{\pi l}{N}},\quad c_2=\frac{(2\cos\frac{\pi l}{N}+1)e^{-\frac{i\pi l}{N}(1-n_0)}}{4iA\cos\frac{\pi l}{N}},$$

$$f_1=\frac{(2\cos\frac{\pi l}{N}+1)e^{\frac{i\pi l}{N}(1+n_0)}}{4iA\cos\frac{\pi l}{N}},\quad f_2=\frac{\lambda e^{\frac{i\pi ln_0}{N}}}{4iA\cos\frac{\pi l}{N}},$$

$$g_1=\frac{1}{\sqrt2},\quad g_2=\frac{e^{-\frac{i\pi ln_0}{N}}}{\sqrt2},\quad g_3=\frac{e^{-\frac{i\pi l}{N}}}{\sqrt2},\quad g_4=\frac{e^{-\frac{i\pi l}{N}(1+n_0)}}{\sqrt2}.$$

Используя формулы Крамера и формулу (10), после несложных преобразований имеем

$$\psi_{1l}(0) = \frac{A\cos\frac{\pi l}{N}}{\sqrt{2}\big(A\cos\frac{\pi l}{N} - i(2\cos\frac{\pi l}{N}+1)\big)} + O(\varepsilon),$$
$$\psi_{2l}(0) = \frac{A\cos\frac{\pi l}{N}\cdot e^{-\frac{i\pi l}{N}}}{\sqrt{2}\big(A\cos\frac{\pi l}{N} - i(2\cos\frac{\pi l}{N}+1)\big)} + O(\varepsilon),$$
$$\psi_{1l}(n_0) = \frac{A\cos\frac{\pi l}{N}\cdot e^{-\frac{i\pi l n_0}{N}}}{\sqrt{2}\big(A\cos\frac{\pi l}{N} - i(2\cos\frac{\pi l}{N}+1)\big)} + O(\varepsilon),$$
$$\psi_{2l}(n_0) = \frac{A\cos\frac{\pi l}{N}\cdot e^{-\frac{i\pi l(n_0+1)}{N}}}{\sqrt{2}\big(A\cos\frac{\pi l}{N} - i(2\cos\frac{\pi l}{N}+1)\big)} + O(\varepsilon).$$

Из приведенных рассуждений вытекает следующая лемма.

Лемма 1. *Имеют место формулы*

$$a_1^+ = \frac{A\cos\frac{\pi l}{N}}{\sqrt{2}\big(A\cos\frac{\pi l}{N} - i(2\cos\frac{\pi l}{N}+1)\big)}, \quad a_2^+ = \frac{e^{-\frac{i\pi l}{N}}A\cos\frac{\pi l}{N}}{\sqrt{2}\big(A\cos\frac{\pi l}{N} - i(2\cos\frac{\pi l}{N}+1)\big)},$$
$$a_1^- = \frac{i(2\cos\frac{\pi l}{N}+1)}{\sqrt{2}\big(A\cos\frac{\pi l}{N} - i(2\cos\frac{\pi l}{N}+1)\big)}, \quad a_2^- = \frac{e^{-\frac{i\pi l}{N}}i(2\cos\frac{\pi l}{N}+1)}{\sqrt{2}\big(A\cos\frac{\pi l}{N} - i(2\cos\frac{\pi l}{N}+1)\big)}.$$

Обозначим через P^+ и P^- вероятности прохождения и отражения соответственно. При этом выполнены равенства

$$P^+ = |a_1^+|^2 + |a_2^+|^2, \qquad P^- = |a_1^-|^2 + |a_2^-|^2.$$

Из леммы 1 легко следует следующая теорема.

Теорема 1. *Для вероятностей прохождения P^+ и отражения P^- справедливы формулы*

$$P^+ = \frac{A^2\cos^2\frac{\pi l}{N}}{A^2\cos^2\frac{\pi l}{N} + (2\cos\frac{\pi l}{N}+1)^2} + O(\varepsilon),$$
$$P^- = \frac{(2\cos\frac{\pi l}{N}+1)^2}{A^2\cos^2\frac{\pi l}{N} + (2\cos\frac{\pi l}{N}+1)^2} + O(\varepsilon).$$

Замечание 1. Из теоремы 1 следует, что вероятность прохождения P^+ близка к нулю, если $A = k_l/\varepsilon \approx 0$, и вероятность прохождения P^+ близка к единице, если $A = k_l/\varepsilon \approx \infty$, а также если $2\cos(\pi l/N) + 1 \approx 0$. Кроме того, если $\cos(\pi l/N) > 0$, то вероятность прохождения P^+ возрастает, а если $\cos(\pi l/N) < 0$, то убывает с ростом l.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dubois S.M.-M., Zanolli Z., Declerck X., Charlier J.-C. Electronic properties and quantum transport in graphene-based nanostructures // Eur. Phys. J. B. 2009. Vol. 72. No. 1. P. 1–24.
2. Laird E.A., Kuemmeth F., Steele G., Grove-Rasmussen K., Nygård J., Flensberg K., Kouwenhoven L.P. Quantum transport in carbon nanotubes // arXiv: 1403.6113 [cond-mat.mes-hall]. 2014.
3. Charlier J.-C., Blase X., Roche S. Electronic and transport properties of nanotubes // Rev. Modern Phys. 2007. Vol. 79. P. 677–732.
4. Chuburin Yu.P. Electron scattering by impurities in a carbon nanotube near boundary points of subbands // Physics Letters A. 2016. Vol. 380. Issues 1–2. P. 242–247.
5. Морозова Л.Е., Чубурин Ю.П. Квазиуровни гамильтониана для углеродной нанотрубки // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2014. Вып. 4. С. 76–83.

6. Tian W., Datta S. Aharonov–Bohm-type effect in graphene tubules: a Landauer approach // Phys. Rev. B. 1994. Vol. 49. Issue 7. P. 5097–5100.

Поступила в редакцию 29.04.2016

Морозова Людмила Евгеньевна, к. ф.-м. н., доцент, Ижевский государственный технический университет им. М. Т. Калашникова, 426069, Россия, г. Ижевск, ул. Студенческая, 7.
E-mail: luvial@mail.ru

L. E. Morozova
Electron scattering in a carbon nanotube

Keywords: carbon nanotube, Lippmann–Shwinger equation, scattering, reflection and transmission probabilities.

MSC: 81Q10, 81Q15

Carbon nanotubes are being actively studied in the physics literature in the last two decades. Their unique physical properties, in particular high strength and conductivity, are the reason of the promising applications for their use in microelectronics. Despite the relevance of these physical problems, such structures are poorly mathematically studied. In this paper, within the tight-binding approximation, we consider the Hamiltonian of an electron in a single-walled zigzag nanotube with an impurity, evenly distributed in the cross section of the nanotube. Using the Lippmann–Schwinger equation, we investigate the scattering problem for this Hamiltonian in the case of small impurity potential and slow electrons. Since the electronic conductance is proportional to the transmission probability, we actually study the problem of conductance in a nanotube. Simple formulas for the reflection and transmission coefficients are obtained. The conditions of total reflection and total transmission, as well as the conditions of increasing and decreasing the transmission probability are found.

REFERENCES

1. Dubois S.M-M., Zanolli Z., Declerck X., Charlier J-C. Electronic properties and quantum transport in graphene-based nanostructures, *Eur. Phys. J. B.*, 2009, vol. 72, no. 1, pp. 1–24.
2. Laird E.A., Kuemmeth F., Steele G., Grove-Rasmussen K., Nygård J., Flensberg K., Kouwenhoven L.P. Quantum transport in carbon nanotubes, arXiv: 1403.6113 [cond-mat.mes-hall], 2014.
3. Charlier J.-C., Blase X., Roche S. Electronic and transport properties of nanotubes, *Rev. Modern Phys.*, 2007, vol. 79, pp. 677–732.
4. Chuburin Yu.P. Electron scattering by impurities in a carbon nanotube near boundary points of subbands, *Physics Letters A*, 2016, vol. 380, issues 1–2, pp. 242–247.
5. Morozova L.E., Chuburin Yu.P. Quasi-levels of the Hamiltonian for carbon nanotube, *Vestn. Udmurt. Univ. Mat. Mekh. Komp'yut. Nauki*, 2014, no. 4, pp. 76–83 (in Russian).
6. Tian W., Datta S. Aharonov–Bohm-type effect in graphene tubules: a Landauer approach, *Phys. Rev. B.*, 1994, vol. 49, no. 7, pp. 5097–5100.

Received 29.04.2016

Morozova Lyudmila Evgen'evna, Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor, Izhevsk State Technical University, ul. Studencheskaya, 7, Izhevsk, 426069, Russia.
E-mail: luvial@mail.ru