УДК 517.958, 530.145.6

© *Л. Е. Морозова, Ю. П. Чубурин*

КВАЗИУРОВНИ ГАМИЛЬТОНИАНА ДЛЯ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ [1]

В последние два десятилетия углеродные нанотрубки активно исследуются в физической литературе, что обусловлено многообещающими перспективами их применения в микроэлектронике; в то же время интересные математические свойства используемых при этом гамильтонианов, к сожалению, часто остаются без должного внимания математиков. В настоящей статье проведено математически строгое исследование спектральных свойств гамильтониана $H_\varepsilon = H_0 + \varepsilon V$, где гамильтониан электрона в углеродной нанотрубке типа «зигзаг» H_0 записан в приближении сильной связи, а оператор εV (потенциал) имеет вид

$$(\varepsilon V\psi)(n) = \varepsilon \begin{pmatrix} V_1\psi_1(n) \\ V_2\psi_2(n) \end{pmatrix} \delta_{n0};$$

здесь $\varepsilon > 0$, V_1, V_2 — вещественные числа, δ_{n0} — символ Кронекера. Гамильтониан H_ε отвечает углеродной нанотрубке с примесью, равномерно распределенной в сечении нанотрубки. Данный гамильтониан является разностным оператором, определенным на функциях из $(l^2(\Omega))^2$, где $\Omega = \mathbb{Z} \times \{0, 1, \ldots, N-1\}$, $N \geqslant 2$, удовлетворяющих периодическим граничным условиям. В статье, в частности, доказано, что для каждой подзоны спектра вблизи одной из граничных точек подзоны в случае малых потенциалов существует ровно один квазиуровень, то есть собственное значение или резонанс. Для квазиуровней получены асимптотические формулы вида

$$\lambda_l^{\pm} = \pm\left|2\cos\frac{\pi l}{N} + 1\right| \cdot \left(1 + \frac{\varepsilon^2 (V_1 + V_2)^2}{16\cos\frac{\pi l}{N}}\right) + O(\varepsilon^3),$$

где l — номер подзоны, N — число атомов в сечении нанотрубки, $\pm$ — знак λ. Также найдено условие того, когда квазиуровень является собственным значением.

Ключевые слова: гамильтониан углеродной нанотрубки, собственное значение, резонанс.

Введение

В последние два десятилетия углеродные нанотрубки активно исследуются в физической литературе (см., например, [1–3]), что обусловлено многообещающими перспективами их применения в микроэлектронике. Гамильтониан для однослойной (single-wall) углеродной нанотрубки в приближении сильной связи можно получить, рассматривая одноэлектронный оператор Шрёдингера в приближении сильной связи в полоске графена (представляющего собой двумерную кристаллическую решетку из атомов углерода, расположенных в вершинах правильных шестиугольников — узлах) с периодическими граничными условиями, отвечающими сворачиванию полоски в трубку. При этом для удобства нумерации узлов естественным образом вводятся две подрешетки; узел любой из подрешеток окружен тремя узлами другой подрешетки. Волновая функция электрона ψ определена на узлах решетки. Сужения на подрешетки обозначим через ψ_j, $j = 1, 2$ (это так называемые псевдоспиновые компоненты ψ), тогда $\psi = \big(\psi_1(n,m), \psi_2(n,m)\big)$, где n, m — целочисленные координаты, нумерующие пары соседних узлов из разных подрешеток.

В статье рассматриваются углеродные нанотрубки типа «зигзаг» [1, 2]. Амплитуды перескока t электрона на соседний атом предполагаются одинаковыми, без ограничения общности полагаем $t = 1$. Соответствующий гамильтониан является разностным оператором вида [1, 2]

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

[1]Работа выполнена при частичной поддержке УрО РАН (грант 12–У–2–1021).

Оператор H_0 действует в подпространстве гильбертова пространства $\bigl(l^2(\Omega)\bigr)^2$, где $\Omega = \mathbb{Z}\times \times\{0,1,\ldots,N-1\}$, $N \geqslant 2$, образованном функциями, удовлетворяющими периодическим граничным условиям $\psi|_{m=0} = \psi|_{m=N}$. Положим $H_\varepsilon = H_0+\varepsilon V$, где $\varepsilon > 0$, а оператор εV (потенциал) действует по формуле

$$(\varepsilon V\psi)(n) = \varepsilon\begin{pmatrix} V_1\psi_1(n)\\ V_2\psi_2(n)\end{pmatrix}\delta_{n0},$$

где V_1, V_2 — вещественные числа, δ_{n0} — символ Кронекера. Потенциал V моделирует воздействие примеси, равномерно распределенной в сечении нанотрубки, на электрон.

В данной статье изучаются спектральные свойства оператора H_ε. В частности, для каждой подзоны спектра в случае малых ε доказано существование вблизи одной из граничных точек подзоны ровно одного квазиуровня (то есть собственного значения или резонанса). Для квазиуровней получены асимптотические формулы, а также условие того, когда квазиуровень является резонансом.

Через $\sigma(A)$ и $\sigma_{\rm ess}(A)$ обозначим спектр и существенный спектр оператора A соответственно.

§ 1. Резольвента и спектр оператора H_0

Найдем резольвенту $R_0(\lambda) = (H_0-\lambda I)^{-1}$ оператора H_0. Для этого решим уравнение

$$(H_0-\lambda I)\psi = \varphi \tag{1}$$

в пространстве $\bigl(l^2(\Omega)\bigr)^2$ относительно ψ. Функции $\exp\bigl(-i\frac{2\pi lm}{N}\bigr)/\sqrt{N}$, $l = 0,\ldots,N-1$, образуют ортонормированный базис в пространстве $L^2\{0,\ldots,N-1\}$, поэтому для функций $\psi = (\psi_1,\psi_2)$ из области определения оператора H имеем

$$\psi_j(n,m) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{l=0}^{N-1}\psi_{jl}(n)e^{-\frac{2\pi ilm}{N}}, \tag{2}$$

где

$$\psi_{jl}(n) = \bigl(\psi_j(n,m), \frac{1}{\sqrt{N}}e^{-\frac{2\pi ilm}{N}}\bigr)$$

(через $(\cdot,\cdot)$ обозначено скалярное произведение в $L^2\{0,\ldots,N-1\}$). Из (1), (2) имеем

$$(H_0\psi)(n,m) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{l=0}^{N-1}\begin{pmatrix}\psi_{2l}(n)+\psi_{2l}(n-1)+e^{\frac{2\pi il}{N}}\psi_{2l}(n)\\ \psi_{1l}(n)+\psi_{1l}(n+1)+e^{-\frac{2\pi il}{N}}\psi_{1l}(n)\end{pmatrix}e^{-\frac{2\pi ilm}{N}}.$$

Таким образом, уравнение (1) распадается на совокупность независимых линейных систем вида

$$\begin{cases}\psi_{2l}(n)+\psi_{2l}(n-1)+e^{\frac{2\pi il}{N}}\psi_{2l}(n)-\lambda\psi_{1l}(n) = \varphi_{1l}(n),\\ \psi_{1l}(n)+\psi_{1l}(n+1)+e^{-\frac{2\pi il}{N}}\psi_{1l}(n)-\lambda\psi_{2l}(n) = \varphi_{2l}(n)\end{cases} \tag{3}$$

для $l = 0,\ldots,N-1$. Используя преобразование Фурье

$$\psi(n)\in l^2(\mathbb{Z})\mapsto \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{n\in\mathbb{Z}}\psi(n)e^{-ikn} = \widehat{\psi}(k)\in L^2[\pi,\pi), \tag{4}$$

преобразуем систему (3) к виду

$$\begin{pmatrix} -\lambda & 1+e^{-ik}+e^{\frac{2\pi il}{N}}\\ 1+e^{ik}+e^{-\frac{2\pi il}{N}} & -\lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\widehat{\psi}_{1l}\\ \widehat{\psi}_{2l}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\widehat{\varphi}_{1l}\\ \widehat{\varphi}_{2l}\end{pmatrix},\quad l = 0,\ldots,N-1.$$

Отсюда по формулам Крамера находим

$$\begin{aligned}\widehat{\psi}_{1l} &= -\frac{\lambda\widehat{\varphi}_{1l} + (1 + e^{-ik} + e^{\frac{2\pi il}{N}})\widehat{\varphi}_{2l}}{\lambda^2 - \Big[3 + 2\Big(\cos k + \cos\dfrac{2\pi l}{N} + \cos\big(k + \dfrac{2\pi l}{N}\big)\Big)\Big]},\\ \widehat{\psi}_{2l} &= -\frac{\lambda\widehat{\varphi}_{2l} + (1 + e^{ik} + e^{-\frac{2\pi il}{N}})\widehat{\varphi}_{1l}}{\lambda^2 - \Big[3 + 2\Big(\cos k + \cos\dfrac{2\pi l}{N} + \cos\big(k + \dfrac{2\pi l}{N}\big)\Big)\Big]}, \quad l = 0, \ldots, N-1.\end{aligned} \tag{5}$$

Условие обращения в нуль знаменателей в (5) хотя бы при некоторых k и l позволяет найти спектр оператора H_0. После несложных преобразований имеем

$$3 + 2\Big(\cos k + \cos\frac{2\pi l}{N} + \cos\big(k + \frac{2\pi l}{N}\big)\Big) = \Big(2\cos\frac{\pi l}{N} \mp 1\Big)^2 + 4\cos\frac{\pi l}{N}\Big(\cos\big(k + \frac{\pi l}{N}\big) \pm 1\Big). \tag{6}$$

Условием принадлежности λ спектру оператора H_0 является принадлежность λ^2 множеству значений одной из функций (6), то есть промежутку

$$\Big[\big(2\cos\frac{\pi l}{N} - 1\big)^2, \big(2\cos\frac{\pi l}{N} + 1\big)^2\Big]$$

в случае $\cos\dfrac{\pi l}{N} \geqslant 0$ и промежутку

$$\Big[\big(2\cos\frac{\pi l}{N} + 1\big)^2, \big(2\cos\frac{\pi l}{N} - 1\big)^2\Big] = \Big[\big(2\cos\frac{\pi l'}{N} - 1\big)^2, \big(2\cos\frac{\pi l'}{N} + 1\big)^2\Big],$$

где $l' = N - l$, в случае $\cos\dfrac{\pi l}{N} < 0$. Таким образом, справедливо следующее утверждение.

Теорема 1. *Имеет место равенство*

$$\sigma(H_0) = [-3, -a] \cup [a, 3],$$

где $a = \min\limits_{l:\cos\frac{\pi l}{N}\geq 0} |2\cos\frac{\pi l}{N} - 1|$.

Области значений функций

$$\lambda = \pm\sqrt{\Big[3 + 2\big(\cos k + \cos\frac{2\pi l}{N} + \cos(k + \frac{2\pi l}{N})\big)\Big]},$$

объединение которых образует спектр, будем называть *подзонами.*

Замечание 1. Если N делится на три, то $a = 0$ и спектр совпадает с $[-3, 3]$, в противном случае в спектре оператора H_0 есть щель — интервал $(-a, a)$. Очевидно, что $a = a(N) \to 0$ при $N \to \infty$. Если N четно, то при $l_0 = N/2$, согласно (6), получаем две вырожденные в точку подзоны $\{\pm 1\}$. Уравнение $H_0\psi = \pm\psi$ для $\psi(n, m) = (1/\sqrt{N})\psi_{l_0}(n)e^{\frac{2\pi iml_0}{N}}$ имеет, в силу (3) с $\varphi = 0$, вид $\psi_{2l_0}(n-1) = \pm\psi_{1l_0}(n)$. Это уравнение имеет бесконечно много линейно независимых решений вида $\psi_{l_0}(n) = (\delta_{n,n_0}, \pm\delta_{n,n_0+1})$, $n_0 \in \mathbb{Z}$, где δ_{nm} — символ Кронекера. Таким образом, $\lambda = \pm 1$ — это собственные значения бесконечной кратности.

Теорема 2. *Справедливо равенство*

$$\sigma_{\text{ess}}(H) = \sigma_{\text{ess}}(H_0) = \sigma(H_0).$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Оператор $VR_0(\lambda)$, где $\lambda \in \sigma(H_0)$, есть оператор конечного ранга, а следовательно, компактный оператор. В силу теоремы об относительно компактных возмущениях [4] имеем утверждение теоремы. $\square$

Далее для нахождения резольвенты оператора H_0 вычислим интегралы (см. (4), (5))

$$\psi_{jl}(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} e^{ikn} \widehat{\psi}_{jl}(k)\, dk,$$

которые в случае $\cos \frac{\pi l}{N} \neq 0$, согласно (5), (6), сводятся к интегралу вида

$$B = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} \frac{e^{ikn}\widehat{\varphi}(k)\, dk}{\alpha_l - 2\cos\big(k + \frac{\pi l}{N}\big)} = \frac{e^{-\frac{i\pi ln}{N}}}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} \frac{e^{ikn}\widehat{\varphi}\big(k - \frac{\pi l}{N}\big)\, dk}{\alpha_l - 2\cos k}, \tag{7}$$

где $\widehat{\varphi}(k) \in L^2(0, 2\pi)$ продолжается по периодичности на числовую ось, и

$$\alpha_l = \frac{\lambda^2 - 3 - 2\cos\frac{2\pi l}{N}}{2\cos\frac{\pi l}{N}}. \tag{8}$$

Рассмотрим в $l^2(\mathbb{Z})$ уравнение вида $(h_0 - \lambda)\psi = \varphi$ относительно неизвестной ψ, где

$$(h_0\psi)(n) = \psi(n+1) + \psi(n-1).$$

После преобразования Фурье (4) уравнение примет вид

$$(2\cos k - \lambda)\widehat{\psi}(k) = \widehat{\varphi}(k),$$

откуда находим резольвенту $r_0(\lambda)$ оператора h_0:

$$\psi(n) = (r_0(\lambda)\varphi)(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} \frac{e^{ikn}\widehat{\varphi}(k)\, dk}{2\cos k - \lambda} = \frac{1}{2i\sin\theta} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} e^{\pm i\theta|n-n'|}\varphi(n'), \tag{9}$$

где $\cos\theta = \lambda/2$, $\sin\theta = -\sqrt{1 - (\lambda/2)^2}$ (см. [5]). Корень считается арифметическим для $1 - (\lambda/2)^2 > 0$. Используя равенство

$$\widehat{\varphi}\big(k - \frac{\pi l}{N}\big) = \big(\widehat{e^{\frac{i\pi ln}{N}}\varphi(n)}\big),$$

из (7), (9) имеем

$$B = -\frac{e^{-\frac{i\pi ln}{N}}}{2i\sin\theta} \sum_{n' \in \mathbb{Z}} e^{i\theta|n-n'|} \cdot e^{\frac{i\pi ln'}{N}} \varphi(n'), \tag{10}$$

где

$$\cos\theta = \alpha_l/2, \quad \sin\theta = -\sqrt{1 - (\alpha_l/2)^2}.$$

Знаменатель в (5) в силу (6) и (8) равен

$$2\cos\frac{\pi l}{N}\Big(\alpha_l - 2\cos\big(k + \frac{\pi l}{N}\big)\Big). \tag{11}$$

Предполагаем, что выполнено условие $\alpha_l \neq 2$, тогда $\sin\theta \neq 0$. Заметим, что согласно (4)

$$\widehat{\varphi(n \pm 1)} = e^{\pm ik}\widehat{\varphi}(k).$$

Таким образом, из (5), (7), (10) и (11) получаем следующее утверждение.

Лемма 1. *Резольвента R_0 оператора H_0 имеет вид*

$$
\begin{aligned}
(R_0(\lambda)\varphi)_{1l}(n) &= \frac{1}{4i\cos\frac{\pi l}{N}\sin k_l}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}\Big(e^{ik_l|n-n'|}e^{-\frac{i\pi l(n-n')}{N}}(\lambda\varphi_{1l}(n')+(1+e^{\frac{2\pi il}{N}})\varphi_{2l}(n'))+\\
&\qquad + e^{ik_l|n-n'-1|}e^{-\frac{i\pi l(n-n'-1)}{N}}\varphi_{2l}(n')\Big),\\
(R_0(\lambda)\varphi)_{2l}(n) &= \frac{1}{4i\cos\frac{\pi l}{N}\sin k_l}\sum_{n'\in\mathbb{Z}}\Big(e^{ik_l|n-n'|}e^{-\frac{i\pi l(n-n')}{N}}(\lambda\varphi_{2l}(n')+(1+e^{-\frac{2\pi il}{N}})\varphi_{1l}(n'))+\\
&\qquad + e^{ik_l|n-n'+1|}e^{-\frac{i\pi l(n-n'+1)}{N}}\varphi_{1l}(n')\Big)
\end{aligned}
\tag{12}
$$

в случае $l\neq N/2$ и имеет вид

$$
(R_0(\lambda)\varphi)_{1l}(n) = -\frac{\lambda\varphi_{1l}(n)+\varphi_{2l}(n-1)}{\lambda^2-1},
$$

$$
(R_0(\lambda)\varphi)_{2l}(n) = -\frac{\lambda\varphi_{2l}(n)+\varphi_{1l}(n-1)}{\lambda^2-1}
$$

в случае четного N для $l=N/2$. Здесь

$$
\sin k_l = -\sqrt{1-\cos^2 k_l},\quad \cos k_l = \frac{\lambda^2-3-2\cos\frac{2\pi l}{N}}{4\cos\frac{\pi l}{N}}. \tag{13}
$$

§ 2. Исследование квазиуровней

Уравнение Шрёдингера $H_\varepsilon\psi=\lambda\psi$, в области, где существует ядро резольвенты $R_0(\lambda)$ (функция Грина оператора H_0), можно записать в виде

$$
\psi = -R_0(\lambda)(V\psi), \tag{14}
$$

где функция ψ произвольна. При этом согласно лемме 1 уравнение (14) распадается в N уравнений для $l=1,\dots,N$, то есть для каждой подзоны. В дальнейшем предполагаем, что резольвента в каждой из подзон аналитически продолжена по параметру k_l своей функцией Грина на соответствующую риманову поверхность.

Определение 1. Число λ (или соответствующее k_l), для которого существует ненулевое решение $\psi\notin\big(l^2(\Omega)\big)^2$ уравнения (14), будем называть *резонансом* оператора H_ε.

Определение 2. *Квазиуровнем* оператора H_ε назовем его собственное значение или резонанс.

Теорема 3. *Предположим, что $2\cos\frac{\pi l}{N}+1\neq 0$, $l\neq N/2$. Тогда для каждого $l=0,\dots,N-1$ и всех достаточно малых $\varepsilon>0$ существуют ровно два квазиуровня $\lambda_l^\pm=\lambda_l^\pm(\varepsilon,V_1,V_2)$ оператора H_ε, аналитически зависящие от ε, V_1 и V_2, для которых справедлива формула*

$$
\lambda_l^\pm = \pm\Big|2\cos\frac{\pi l}{N}+1\Big|\cdot\Big(1+\frac{\varepsilon^2(V_1+V_2)^2}{16\cos\frac{\pi l}{N}}\Big)+O(\varepsilon^3),
$$

где $\pm$ — это знак λ.

Доказательство. Запишем уравнение (14) в виде системы

$$
\begin{cases}
\psi_{1l}(0) = \dfrac{i\beta\varepsilon}{\sin k_l}\Big[\lambda V_1\psi_{1l}(0)+\big(1+e^{\frac{2i\pi l}{N}}V_2\psi_{2l}(0)\big)+e^{ik_l}e^{\frac{i\pi l}{N}}V_2\psi_{2l}(0)\Big],\\
\psi_{2l}(0) = \dfrac{i\beta\varepsilon}{\sin k_l}\Big[\lambda V_2\psi_{2l}(0)+\big(1+e^{-\frac{2i\pi l}{N}}V_1\psi_{1l}(0)\big)+e^{ik_l}e^{-\frac{i\pi l}{N}}V_1\psi_{1l}(0)\Big],
\end{cases}
\tag{15}
$$

где $\beta = 1/(4\cos\frac{\pi l}{N})$. Определитель Δ системы (15) имеет вид

$$\Delta = \frac{1}{\sin^2 k_l}\Big[(\sin k_l - i\beta\varepsilon\lambda V_1)(\sin k_l - i\beta\varepsilon\lambda V_2) + \beta^2\varepsilon^2 V_1 V_2\big(2\cos\frac{\pi l}{N} + e^{ik_l}\big)^2\Big]. \tag{16}$$

Далее, согласно (13)

$$\lambda^2 = 4\cos k_l \cos\frac{\pi l}{N} + 2\cos\frac{2\pi l}{N} + 3 = 4\cos\frac{\pi l}{N} + 2\big(2\cos^2\frac{\pi l}{N} - 1\big) +$$
$$+ 3 - 2k_l^2\cos\frac{\pi l}{N} + O(k_l^4) = (2\cos\frac{\pi l}{N} + 1)^2 - 2k_l^2\cos\frac{\pi l}{N} + O(k_l^4),$$

откуда

$$\lambda = \pm\Big(\big|2\cos\frac{\pi l}{N} + 1\big| - \frac{\cos\frac{\pi l}{N}}{|2\cos\frac{\pi l}{N} + 1|}k_l^2\Big) + O(k_l^4), \tag{17}$$

где $\pm$ — это знак λ. Уравнение $\Delta = \Delta(k_l) = 0$, описывающее квазиуровни, пользуясь (16) и вводя переменную $z = \sin k_l$ (при этом $k_l = \arcsin z = z + O(z^2)$), запишем в виде

$$\big(1 + \varepsilon O(1)\big)z^2 \mp i\beta\varepsilon\big|2\cos\frac{\pi l}{N} + 1\big| \cdot (V_1 + V_2)z + \varepsilon^2 O(z) = 0. \tag{18}$$

Уравнение (18) имеет «лишнее» решение $z = 0$, то есть $k_l = 0$, которое не является квазиуровнем. Сократив на z, получаем уравнение

$$z = \pm\frac{1}{1 + \varepsilon O(1)}\Big(i\beta\varepsilon\big|2\cos\frac{\pi l}{N} + 1\big| \cdot (V_1 + V_2) + \varepsilon^2 O(1)\Big). \tag{19}$$

Правую часть (19) можно рассматривать как аналитическую функцию переменных z, ε, V_1 и V_2. В силу теоремы о неявной функции [6] в некоторой окрестности нуля для всех достаточно малых ε существует единственное решение $z = z(\varepsilon, V_1, V_2)$ (а значит, и $k_l = k_l(\varepsilon, V_1, V_2)$) уравнения (19), аналитически зависящее от параметров ε, V_1 и V_2. Далее, из (19) получаем асимптотическую формулу

$$z = \pm\frac{i\varepsilon\big|2\cos\frac{\pi l}{N} + 1\big| \cdot (V_1 + V_2)}{4\cos\frac{\pi l}{N}} + O(\varepsilon^2), \tag{20}$$

причем эта же формула, очевидно, справедлива и для k_l вместо z. Из (17) и (20) получаем утверждение теоремы.

Замечание 2. Если $(V_1 + V_2)/\cos\frac{\pi l}{N} > 0$ в случае положительного квазиуровня λ_l^+, то согласно (12), (14) соответствующая (обобщенная) собственная функция экспоненциально убывает при $|n| \to \infty$ и λ_l^+ является собственным значением, в противном случае обобщенная собственная функция экспоненциально возрастает и λ_l^+ является резонансом. Если при этом $\cos\frac{\pi l}{N} > 0$, то квазиуровень находится вблизи верхней граничной точки подзоны, а если $\cos\frac{\pi l}{N} < 0$ — то вблизи нижней (см. рассуждение перед теоремой 1). Подобное утверждение справедливо и для отрицательного квазиуровня λ_l^-.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dubois S.M.-M., Zanolli Z., Declerck X., Charliera J.-C. Electronic properties and quantum transport in graphene-based nanostructures // Eur. Phys. J. B. 2009. Vol. 72. 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. http://arxiv.org/pdf/1403.6113v1.pdf

3. Charlier J.-C., Blase X., Roche S. Electronic and transport properties of nanotubes // Rev. Mod. Phys. 2007. Vol. 79. P. 677–732.
4. Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т. 4. Анализ операторов. М.: Мир, 1982. 428 с.
5. Baranova L.Y., Chuburin Y.P. Quasi-levels of the two-particle discrete Schrödinger operator with a perturbed periodic potential // J. Phys. A.: Math. Theor. 2008. Vol. 41. 435205 (11 p).
6. Ганнинг Р., Росси Х. Аналитические функции многих комплексных переменных. М.: Мир, 1969. 396 с.

Поступила в редакцию 30.10.2014

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

Чубурин Юрий Павлович, д. ф.-м. н., ведущий научный сотрудник, отдел теоретической физики, Физико-технический институт УрО РАН, 426000, Россия, г. Ижевск, ул. Кирова, 132.
E-mail: chuburin@ftiudm.ru

L. E. Morozova, Yu. P. Chuburin
Quasi-levels of the Hamiltonian for a carbon nanotube

Keywords: Hamiltonian of a carbon nanotube, eigenvalue, resonance.

MSC: 81Q10, 81Q15

In the past two decades, carbon nanotubes have been actively investigated in the physics literature, because of the promising prospects for their use in microelectronics; at the same time, interesting mathematical properties of used Hamiltonians, unfortunately, are often overlooked by mathematicians. In this paper, we carry out the mathematically rigorous investigation of spectral properties of the Hamiltonian $H_\varepsilon = H_0 + \varepsilon V$, where the Hamiltonian H_0 of an electron in a zigzag carbon nanotube is written in the tight-binding approach, and the operator εV (potential) has the form

$$(\varepsilon V\psi)(n) = \varepsilon\begin{pmatrix} V_1\psi_1(n) \\ V_2\psi_2(n)\end{pmatrix}\delta_{n0}$$

(here $\varepsilon > 0$, V_1, V_2 are real numbers, δ_{n0} is the Kronecker delta). The Hamiltonian H_ε corresponds to the carbon nanotube with an impurity uniformly distributed over the cross section of the nanotube. This Hamiltonian is the difference operator defined on functions from $(l^2(\Omega))^2$, where $\Omega = \mathbb{Z} \times \{0, 1, \ldots, N-1\}$, $N \geqslant 2$, satisfying the periodic boundary conditions. In particular, in this paper we prove that for each subband of the spectrum near one of the boundary points of the subband exactly one quasilevel (i.e. eigenvalue or resonance) exists in the case of small potentials. For quasilevels, the asymptotic formulas of the form

$$\lambda_l^\pm = \pm\Big|2\cos\frac{\pi l}{N} + 1\Big| \cdot \Big(1 + \frac{\varepsilon^2(V_1+V_2)^2}{16\cos\frac{\pi l}{N}}\Big) + O(\varepsilon^3),$$

are obtained, where l is the subband number, N is the number of atoms in the cross section of the nanotube, and $\pm$ is the sign of the λ. Also, we find the condition when a quasilevel is an eigenvalue.

REFERENCES

1. Dubois S.M.-M., Zanolli Z., Declerck X., Charliera J.-C. Electronic properties and quantum transport in graphene-based nanostructures, *Eur. Phys. J. B.*, 2009, vol. 72, 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, 2014, arXiv: 1403.6113 [cond-mat.mes-hall]. http://arxiv.org/pdf/1403.6113v1.pdf

3. Charlier J.-C., Blase X., Roche S. Electronic and transport properties of nanotubes, *Rev. Mod. Phys.*, 2007, vol. 79, pp. 677–732.

4. Reed M. Simon B. *Methods of modern mathematical physics. IV. Analysis of operators*, New York: Academic Press, 1978. Translated under the title *Metody sovremennoi matematicheskoi fiziki. IV. Analiz operatorov*, Moscow: Mir, 1982, 428 p.

5. Baranova L.Y., Chuburin Y.P. Quasi-levels of the two-particle discrete Schrödinger operator with a perturbed periodic potential, *J. Phys. A.: Math. Theor.*, 2008, vol. 41, 435205 (11 p).

6. Gunning R., Rossi H. *Analytic functions of several complex variables*, New York: Prentice-Hall, 1965. Translated under the title *Analiticheskie funktsii mnogikh kompleksnykh peremennykh*, Moscow: Mir, 1969, 396 p.

Received 30.10.2014

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

Chuburin Yurii Pavlovich, Doctor of Physics and Mathematics, Leading Researcher, Physical Technical Institute, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, ul. Kirova, 132, Izhevsk, 426000, Russia.
E-mail: chuburin@ftiudm.ru