

# Расчет зонной структуры нехиральной полупроводниковой и металлической углеродных нанотрубок

С.М.Р. Хуссейн<sup>1,2</sup>, С.И. Харитонов<sup>1,3</sup>, В.С. Павельев<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Самара, Россия

<sup>2</sup>University of Karbala, Karbala, Iraq, 56001

<sup>3</sup>Институт систем обработки изображений РАН – филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Самара, Россия, 443001

**Аннотация.** В работе предложен новый формализм метода линеаризованных присоединенных цилиндрических волн. Для построения базисных функций электронный потенциал берется сферически симметричным в атомных областях, постоянным в промежуточной области и цилиндрически симметричным в вакуумных областях. Базисные функции метода, получаемые из решения уравнения Шредингера в соответствующих областях, сшиваются на границах МТ-сфер и цилиндрических поверхностях трубки, образуя всюду непрерывные дифференцируемые функции. Для апробации метода были проведены расчеты зонной структуры нехиральной полупроводниковой и металлической одностенных углеродных нанотрубок.

## 1. Введение

Углеродные нанотрубки были обнаружены Ииджимой в 1991 году как побочные продукты синтеза фуллеренов [1]. Нанотрубки демонстрируют целый спектр самых неожиданных физических свойств, открывающих широкие возможности для их применения в технике. Исследование электронного строения (зонной структуры) нанотрубок позволяет определить тип проводимости, оптические свойства, для полупроводниковых трубок – ширину запрещенной зоны, и ряд других электрофизических свойств.

Для расчета электронного строения углеродных нанотрубок с учетом трансляционной симметрии авторами разработан метод линейных присоединенных цилиндрических волн (ЛПЦВ) [1–3]. Метод ЛПЦВ представляет собой распространение на молекулы с цилиндрическим строением метода линейных присоединенных плоских волн (ЛППВ), хорошо известного и одного из наиболее точных в теории зонной структуры кристаллов [4–6]. Основным аргумент в пользу использования цилиндрических волн для описания нанотрубок состоит в том, что при таком выборе базиса в явной форме учитывается реальная цилиндрическая геометрия нанотрубок, за счет чего, в частности, обеспечивается быстрая сходимость процедуры вычислений. Однако все предыдущие расчеты одностенных и двухстенных углеродных и неуглеродных нанотрубок методом ЛПЦВ были ограничены нехиральными трубками ( $n, p$ ) типа "кресло" и ( $n, 0$ ) типа "зигзаг" с небольшими числами

атомов в расчете на трансляционную элементарную ячейку [1–3, 7–12]. В случае хиральных нанотрубок даже сравнительно малого диаметра число атомов в трансляционной ячейке может быть очень большим. Например, в трансляционной ячейке нехиральной трубки (10, 10) содержится 40 атомов, а в хиральной трубке (10, 9) даже несколько меньшего диаметра 1084 атома. Как известно, требуемый для сходимости базис быстро возрастает с увеличением числа атомов в элементарной ячейке.

## 2. Метод расчета

При построении базисных функций метода ЛПЦВ и решении уравнения Шредингера делается предположение о том, что потенциал имеет так называемую цилиндрическую muffin-tin (МТ) форму. В этом приближении атомы трубки окружаются непересекающимися атомными сферами, и пространство разделяется на области трех типов: области  $\Omega_s$ , внутри МТ сфер радиуса  $r_s$ , центрированных атомами сорта  $s$ ; область  $\Omega_l$  вне МТ сфер между внутренней и внешней цилиндрическими поверхностями трубки — так называемая промежуточная область; две вакуумные области  $\Omega_v$  вне цилиндрических поверхностей трубки — внутренняя  $\Omega_i$  и внешняя  $\Omega_o$ .

Каждая из этих областей характеризуется своим видом одноэлектронного потенциала. Внутри МТ сфер потенциал сферически симметричен; в промежуточной области потенциал постоянен; в вакуумных областях потенциал цилиндрически симметричен. Таким образом, потенциал имеет вид:

$$V(r) = V(|r - \tau_s|), r \in \Omega_s, \quad (1)$$

$$V(r) = V(\rho), r \in \Omega_v,$$

$$V(r) = V_c, r \in \Omega_l,$$

где  $\tau_s$  — базисный вектор, указывающий положение атома сорта  $s$  в элементарной ячейке. Отметим, что потенциал в цилиндрической muffin-tin форме используется лишь при построении базисных функций. Определив систему базисных функций, мы можем использовать потенциал общего вида при построении матричных элементов гамильтониана. Рассмотрим вид базисной функции в каждой из трех указанных выше областей.

## 3. Базисные функции

В промежуточной области базисная функция удовлетворяет уравнению Шредингера для свободной частицы. Внутри МТ-сфер и в вакуумных областях, по аналогии с объемным [5] и пленочным [6] методом ЛППВ, базисная функция берется как линейная комбинация решения уравнения Шредингера и его энергетической производной. Уравнение Шредингера внутри МТ-сфер и в вакуумных областях решается при фиксированных значениях энергии.

### 3.1. Промежуточная область

В промежуточной области, где потенциал постоянен и принимается за начало отсчета энергии, базисная функция удовлетворяет уравнению Шредингера для свободного пространства, которое в цилиндрической системе координат имеет вид:

$$-\left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \times \Psi(\rho, \phi, z) = E \Psi(\rho, \phi, z). \quad (2)$$

Общее решение этого уравнения может быть записано как:

$$\Psi = \Psi_{\mu MN}(\rho, \phi, z) = \varphi_{\mu}(z) \varphi_M(\phi) R_{MN}(\rho), \quad (3)$$

где функции  $\varphi_{\mu}(z)$  и  $\varphi_M(\phi)$  описывают свободное движение электронов вдоль оси трансляционной симметрии трубки и свободное вращение вокруг оси симметрии, соответственно:

$$\varphi_{\mu}(z) = \frac{1}{\sqrt{c}} e^{ik_{\mu}z}, \quad -\frac{\pi}{c} \leq k \leq \frac{\pi}{c},$$

$$k_{\mu} = k + \frac{2\pi}{c}\mu, \quad \mu = 0, \pm 1, \dots, \quad (4)$$

$$\varphi_M(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iM\varphi}, \quad M = 0, \pm 1, \dots \quad (5)$$

Здесь  $e$  – период решетки вдоль трансляционного направления,  $k$  – одномерный волновой вектор электрона, принадлежащий первой зоне Бриллюэна.

Функция  $R_{MN}(\rho)$  описывает радиальное движение свободных электронов в промежуточной области,  $N$  – радиальное квантовое число. Подставив разложение (3) в (2) с учетом (4) и (5), получим уравнение на функцию  $R_{MN}(\rho)$ :

$$\left[ -\left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left( \rho \frac{d}{d\rho} \right) + \frac{M^2}{\rho^2} - (E - k_{\mu}^2) \right) \right] R_{MN}(\rho) = 0. \quad (6)$$

Это уравнение имеет форму уравнения Бесселя [7], общее решение которого имеет вид линейной комбинаций функций Бесселя первого и второго рода:

$$R_{MN}(\rho) = c_{MN}^J J_M(k_{MN}\rho) + c_{MN}^Y Y_M(k_{MN}\rho), \quad (7)$$

здесь введено обозначение:

$$k_{MN} = \sqrt{E - k_{\mu}^2}. \quad (8)$$

Значение  $k_{MN}$  (и тем самым значение энергии) и коэффициентов  $c_{MN}^J$  и  $c_{MN}^Y$  определим, положив  $R_{MN}(\rho)$  равной нулю в точках  $a'$  и  $b'$  ( $a' > a$  и  $b' > b$ , где  $a$  и  $b$  – внешний и внутренний радиусы нанотрубки соответственно):

$$c_{MN}^J J_M(k_{MN}b') + c_{MN}^Y Y_M(k_{MN}b') = 0, \quad (9)$$

$$c_{MN}^J J_M(k_{MN}a') + c_{MN}^Y Y_M(k_{MN}a') = 0.$$

Из условий существования нетривиальных решений системы (9) получаем уравнение для нахождения  $k_{MN}$ :

$$J_M(k_{MN}b') Y_M(k_{MN}a') - J_M(k_{MN}a') Y_M(k_{MN}b') = 0, \quad (10)$$

которое решается численно. Далее определим коэффициенты  $c_{MN}^J$  и  $c_{MN}^Y$ . Окончательно, в промежуточной области базисная функция примет вид:

$$\Psi_l(r) = -\frac{1}{2\pi c} [c_{MN}^J J_M(k_{MN}\rho) + c_{MN}^Y Y_M(k_{MN}\rho)] e^{i(k_{\mu}z + M\varphi)}. \quad (11)$$

### 3.2. Вакуумные области

Во внутренней и внешней вакуумных областях, где потенциал обладает цилиндрической симметрией, уравнение Шредингера имеет вид:

$$\left[ -\left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(\rho) \right] \Psi(\rho, \varphi, z) = E_v \Psi(\rho, \varphi, z). \quad (12)$$

Решение этого уравнения вследствие цилиндрической симметрии потенциала имеет вид:

$$\Psi = \Psi_{\mu M}(\rho, \varphi, z) = \varphi_{\mu}(z) \varphi_M(\varphi) R_{\mu N}(\rho), \quad (13)$$

функции  $\varphi_{\mu}(z)$  и  $\varphi_M(\varphi)$  определяются выражениями соответственно (4) и (5), а для функции  $R_{\mu N}(\rho)$ , описывающей радиальное движение электронов в вакуумной области, подстановкой (13), (4) и (5) в (12) получаем уравнение:

$$\left[ -\left( \frac{1d}{\rho d\rho} \left( \rho \frac{d}{d\rho} \right) + \frac{M^2}{\rho^2} + k_\mu^2 + V(\rho) \right) \right] \times R_{\mu\nu}(\rho) = E_\nu R_{\mu\nu}(\rho). \quad (14)$$

Уравнение (14) численно интегрируется при фиксированном значении энергии  $E_\nu$ , которое является параметром расчета.

Дифференцируя (14) по энергии, получим уравнение для энергетической производной:

$$\left[ -\left( \frac{1d}{\rho d\rho} \left( \rho \frac{d}{d\rho} \right) + \frac{M^2}{\rho^2} + k^2 - E_\nu + V(\rho) \right) \right] \times R_{\mu\nu}(\rho) = \dot{R}_{\mu\nu}(\rho). \quad (15)$$

В вакуумных областях базисную функцию запишем в виде, подобном пленочному методу ЛППВ [6]:

$$\Psi_\nu(r) = -\frac{1}{\sqrt{2\pi c}} [A_{\mu MN}^\nu R_{\mu MN}^\nu(E_\nu, \rho) + B_{\mu MN}^\nu \dot{R}_{\mu MN}^\nu(E_\nu, \rho)] e^{i(k_\mu z + M\phi)}. \quad (16)$$

### 3.3. Области МТ-сфер

Внутри МТ сферы  $s$ -ого атома потенциал сферически симметричен и базисная функция записывается, как и в методе ЛППВ [5], в виде:

$$\Psi_l^s(r) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l [A_{lm}^s R_l^s(E_l, r) + B_{lm}^s \dot{R}_l^s(E_l, r)] \times Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (17)$$

Здесь  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  – сферическая гармоника,  $N_{lm}$  – нормировочный множитель  $P_l^{|m|}(x)$  – присоединенная функция Лежандра.  $R_l^s(E_l, r)$  – решение радиального уравнения Шредингера внутри  $s$ -ой МТ-сферы для энергии  $E_l$ , а  $\dot{R}_l^s(E_l, r)$  – его энергетическая производная.

## 4. Сшивка базисных функций

### 4.1. Поверхность МТ-сфер

Приводя базисную функцию в промежуточной области (11) к локальной сферической системе координат и приравнивания ее значения и нормальную производную на поверхности МТ-сферы к соответствующим величинам для базисной функции внутри МТ-сферы (17), получим систему линейных алгебраических уравнений нахождения коэффициентов  $A_{lm}^s$  и  $B_{lm}^s$ :

$$A_{lm}^s R_l^s(E_l, r_s) + B_{lm}^s \dot{R}_l^s(E_l, r_s) = D_{\mu MN, lms} \times I_1(\mu MN, lms),$$

$$A_{lm}^s \frac{\partial}{\partial r} R_l^s(E_l, r_s) + B_{lm}^s \frac{\partial}{\partial r} \dot{R}_l^s(E_l, r_s) = D_{\mu MN, lms} \times I_2(\mu MN, lms).$$

Выражения для  $D_{\mu MN, lms}$ ,  $I_1(\mu MN, lms)$ ,  $I_2(\mu MN, lms)$  приведены в работе. Главный определитель этой системы [6]:

$$\Delta = R_l^s(E_l, r_s) \frac{\partial}{\partial r} \dot{R}_l^s(E_l, r_s) - \dot{R}_l^s(E_l, r_s) \frac{\partial}{\partial r} R_l^s(E_l, r_s) = -\frac{1}{r^2},$$

тогда:

$$A_{lm}^s = r_s^2 D_{\mu MN, lms} [I_2(\mu MN, lms) \dot{R}_l^s(E_l, r_s) - I_1(\mu MN, lms) \frac{\partial}{\partial r} \dot{R}_l^s(E_l, r_s)],$$

$$B_{lm}^s = r_s^2 D_{\mu MN, lms} [I_1(\mu MN, lms) \frac{\partial}{\partial r} R_l^s(E_l, r_s) - I_2(\mu MN, lms) R_l^s(E_l, r_s)].$$

При расчетах интегралов  $I_1$  и  $I_2$  объем вычислений может быть сокращен в 4 раза при учете четности подынтегральных выражений относительно замены  $\theta \rightarrow \pi - \theta$ .

### 5. Внутренняя и внешняя цилиндрические поверхности трубки

Коэффициенты  $A_{\mu MN}^v$  и  $B_{\mu MN}^v$  в выражении (16) для базисной функции во внутренней и внешней вакуумных областях определим, приравняв базисные функции и их радиальные производные в промежуточной области – формула (11) и в соответствующей вакуумной области – формула (16) на поверхности трубки. Получим систему алгебраических уравнений:

$$A_{\mu MN}^v R_{\mu MN}^v(E_v, \rho_t^v) + B_{\mu MN}^v \dot{R}_{\mu MN}^v(E_v, \rho_t^v) = c_{MN}^J J_M(k_{MN} \rho_t^v) + c_{MN}^Y Y_M(k_{MN} \rho_t^v),$$

$$A_{\mu MN}^v \frac{\partial}{\partial \rho} R_{\mu MN}^v(E_v, \rho_t^v) + B_{\mu MN}^v \frac{\partial}{\partial \rho} \dot{R}_{\mu MN}^v(E_v, \rho_t^v) = k_{MN} [c_{MN}^J J_M'(k_{MN} \rho_t^v) + c_{MN}^Y Y_M'(k_{MN} \rho_t^v)].$$

Штрих у функции Бесселя здесь означает дифференцирование по всему аргументу  $k_{MN} \rho$ . Решая систему, получим:

$$A_{\mu MN}^v = \frac{1}{\Delta^v} \left\{ \frac{\partial}{\partial \rho} \dot{R}_{\mu MN}^v(E_v, \rho_t^v) \times [c_{MN}^J J_M(k_{MN} \rho_t^v) + c_{MN}^Y Y_M(k_{MN} \rho_t^v)] - \dot{R}_{\mu MN}^v(E_v, \rho_t^v) \right\},$$

$$B_{\mu MN}^v = \frac{1}{V^v} \left\{ R_{\mu MN}^v(E_v, \rho_t^v) k_{MN} \times [c_{MN}^J J_M'(k_{MN} \rho_t^v) + c_{MN}^Y Y_M'(k_{MN} \rho_t^v)] - \right.$$

$$\left. - \frac{\partial}{\partial \rho} R_{\mu MN}^v(E_v, \rho_t^v) [c_{MN}^J J_M(k_{MN} \rho_t^v) + c_{MN}^Y Y_M(k_{MN} \rho_t^v)] \right\}.$$

Здесь  $V^v$  – главный определитель системы. На внешней поверхности ( $v=0$ ):  $\rho_t^o = a, V^o = 1/a$ . На внутренней поверхности ( $v=i$ ):  $\rho_t^i = b, V^i = -1/b$ .

### 6. Секулярное уравнение

Конечные выражения для интегралов перекрытия  $\langle \mu_1 M_1 N_1 | \mu_2 M_2 N_2 \rangle$  и матричных элементов гамильтониана  $\langle \mu_1 M_1 N_1 | H | \mu_2 M_2 N_2 \rangle$  имеют громоздкий вид и здесь не приводятся. Стоит отметить, что интегралы перекрытия и матричные элементы гамильтониана оказываются не зависящими от энергии, что позволяет значительно сократить время расчета собственных значений из секулярного уравнения:

$$\det[\langle \mu_1 M_1 N_1 | H | \mu_2 M_2 N_2 \rangle - E \langle \mu_1 M_1 N_1 | \mu_2 M_2 N_2 \rangle] = 0.$$

### 3. Заключение

При расчетах зонной структуры углеродных нанотрубок длину связи мы брали, как и в графене равной 1,42 Å, радиус МТ-сфер атомов углерода –  $r_s = 0,71$ . Область внутри МТ-сфер содержит информацию об атомном потенциале и поэтому естественным является выбор МТ-сфер максимально возможного радиуса, соответствующего касанию МТ-сфер соседних атомов. Внутренний и внешний радиусы нанотрубки (величины  $a$  и  $b$ ) следует выбирать таким образом, чтобы «межстеночное» пространство было минимальным. Этому соответствует нулевой зазор между поверхностью МТ-сферы и стенками трубки, то есть расстояние от ядра атома до внутренней и внешней поверхностей трубки равно радиусу МТ-сферы. В «межстеночном» пространстве вне МТ-сфер потенциал принимается постоянным, в то время как в вакуумной области он берется зависящим от расстояния до оси трубки (то есть, определяется более строго), поэтому представляется разумным свести к минимуму область постоянного потенциала. Произведенные пробные расчеты (с варьированием параметров  $a$  и  $b$ ) подтверждают данное предположение: наилучший результат (в смысле близости ширины валентной зоны нанотрубки к ширине валентной зоны графита и схожесть рассчитанной зонной структуры с результатами, полученными при использовании метода сильной связи [8, 9]), получился при  $a - b = 2r_s$ , то есть при указанном выше выборе внешнего и внутреннего

радиусов нанотрубки. Параметры  $a'$  и  $b'$ , фигурирующие в системе (9), мы брали равными:  $a' = a + r_s$ ,  $b' = b - r_s$ , (18) где  $r_s$  – радиус МТ-сферы. Результат расчета практически не меняется при малых изменениях параметров  $a'$  и  $b'$  (при фиксированном количестве базисных функций) вблизи значений (18). Указанный выбор параметров  $a'$  и  $b'$  согласуется с пленочным методом ЛППВ. В работе [10] аналогичные точки выбираются на расстоянии одного радиуса МТ-сферы от поверхности пленки. В [11] указывается, что результат расчета зонной структуры мало меняется при изменении расстояния от данных точек до поверхности пленки в пределах от 0,5 до 1,5 радиуса МТ-сферы. Энергетические параметры  $E_l$ , входящие в (17), выбирались вблизи центра энергетической зоны, соответствующей данному орбитальному квантовому числу  $l$ . Энергии областей  $E_v$  в (16) брались равными 0,75 потенциала на бесконечности (при выборе потенциала в промежуточной области за начало отсчета энергии). Для апробации метода нами были проведены расчеты зонной структуры нехиральных одностенных углеродных нанотрубок различных типов. Результаты с большой точностью совпадают с результатами в работе [14].

#### 4. Благодарности

Работа выполнена при поддержке Федерального агентства научных организаций (соглашение № 007-ГЗ/Ч3363/26) и Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ), гранты №№ 16-29-09528, 16-29-11744.

#### 5. Литература

- [1] Дьячков, П.Н. Метод линейных присоединенных цилиндрических волн в теории электронной структуры нанопроводов / П.Н. Дьячков, О.М. Кепп, А.В. Николаев // Доклады Академии Наук. Физическая химия. – 1999. – Т. 365, № 2. – С. 215-220.
- [2] Дьячков, П.Н. Учет внутренней полости в методе линейных присоединений цилиндрических волн для электронной структуры нанотрубок / П.Н. Дьячков, Д.В. Киринов // Доклады Академии Наук. – 1999. – Т. 369, № 5. – С. 639-646.
- [3] Дьячков, П.Н. Метод линейных присоединенных цилиндрических волн для нанотрубок в матрице / П.Н. Дьячков, Д.В. Макаев // Доклады Академии Наук. – 2005. – Т. 402, № 6. – С. 785-790.
- [4] Slater, J.C. Wave functions in a periodic potential / J.C. Slater // Physical Review. – 1937. – Vol. 51. – P. 846.
- [5] Koelling D.D. Use of energy derivative of the radial solution in an augmented plane wave method: Application to copper / D.D. Koelling, G.O. Arbman // Journal of Physics F: Metal Physics. – 1975. – Vol. 5. – P. 2041.
- [6] Krakauer, H. Linearized augmented plane-wave method for the electronic band structure of thin films / H. Krakauer, M. Posternak, A.J. Freeman // Physical Review B. – 1979. – Vol. 19(4). – P. 1706-1719.
- [7] D'yachkov, P.N. Electronic structure and interband transitions of metallic carbon nanotubes / P.N. D'yachkov, H. Hermann, D.V. Kirin // Applied Physics Letters. – 2002. – Vol. 81(27). – P. 5228.
- [8] D'yachkov, P.N. Electronic structure and interband transitions of semiconducting carbon nanotubes / P.N. D'yachkov, H. Hermann // Journal of Applied Physics. – 2004. – Vol. 95. – P. 399-402.
- [9] D'yachkov, P.N. Linear augmented cylindrical wave method for embedded carbon nanotubes / P.N. D'yachkov, D.V. Макаев // Physical Review B. – 2006. – Vol. 74. – P. 155442.
- [10] Макаев, Д.В. Зонная структура и оптические переходы в полупроводниковых двустенных углеродных нанотрубках / Д.В. Макаев, П.Н. Дьячков // Письма в ЖЭТФ. – 2006. – Т. 84, № 6. – С. 397-402.

- [11] Головачева, А.Ю. Влияние собственных дефектов на электронное строение BN-нанотрубок / А.Ю. Головачева, П.Н. Дьячков // Письма в ЖЭТФ. – 2005. – Т. 82, №. 11. – С. 834-838.
- [12] D'yachkov, P.N. Electronic structure of embedded carbon nanotubes / P.N. D'yachkov, D.V. Maкаev // Physical Review B. – 2005. – Vol. 71. – P. 081101.
- [13] White, C.T. Helical and rotational symmetries of nanoscale graphitic tubules / C.T. White, D.H. Robertson, J.W. Mintmire // Physical Review B. – 1993. – Vol. 47. – P. 5485.
- [14] Чертков, А.В. Метод метод линейризованных присоединенных цилиндрических волн для расчета зонной структуры нанотрубок / А.В. Чертков, Н.С. Переславцева, И.О. Дубровский, С.И. Курганский// Конденсированные среды и межфазные границы. – 2012. – Т. 14, № 3. – С. 342-348.

## Calculation of the band structure of a nonchiral semiconductor and metallic carbon nanotubes

S.M.R. Hussein<sup>1,2</sup>, S.I. Kharitonov<sup>1,3</sup>, V.S. Pavelyev<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Samara National Research University, 34, Moskovskoye Shosse, Samara, Russia, 443086

<sup>2</sup>University of Karbala, Karbala, Iraq, 56001

<sup>3</sup>Image Processing Systems Institute of RAS - Branch of the FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Molodogvardejskaya st. 151, Samara, Russia, 443001

**Abstract.** We proposed a new formalism of the method of linearized attached cylindrical waves. For the construction of basis functions, the electron potential is taken to be spherically symmetric in atomic regions, constant in the intermediate region and cylindrically symmetric in the vacuum regions. The basic functions of the method, obtained from the solution of the Schrödinger equation in the corresponding domains, are sewn on the boundaries of the MT spheres and the cylindrical surfaces of the tube, forming everywhere continuous differentiable functions. For the approbation of the method, the band structure of the nonchiral semiconductor and metallic single-walled carbon nanotubes was calculated.

**Keywords:** linearized coupled, cylindrical wave method, carbon nanotubes, electronic structure, MT approximation, resonance.