

# Структурные, электронные и магнитные свойства хиральных нанотрубок, инкапсулированных линейной цепочкой железа

В.Г. Бутько<sup>1</sup>, А.А. Гусев<sup>1,2</sup>, Т.Н. Шевцова<sup>1</sup>, Ю.Г. Пашкевич<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины  
ул. Розы Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина

E-mail: pashkevi@fti.dn.ua

<sup>2</sup>Донецкий национальный университет, ул. Университетская, 24, г. Донецк, 83001, Украина

Статья поступила в редакцию 18 октября 2013 г., после переработки 8 января 2014 г.,  
опубликована онлайн 21 апреля 2014 г.

Методами теории функционала плотности впервые выполнены расчеты электронной структуры хиральных нанотрубок семейства  $(n,n/2)$ , инкапсулированных линейной цепочкой атомов Fe. При инкапсулировании изначально полупроводниковых нанотрубок  $Fe_5@(4,2)$ ,  $Fe_5@(6,3)$  и  $Fe_5@(8,4)$  цепочкой атомов железа все нанотрубки становятся металлическими. В структуре  $Fe_5@(8,4)$  проводит только цепочка железа. Во всех рассмотренных нанотрубках сохраняется большая энергия магнитной анизотропии, характерная для свободной линейной цепочки атомов железа. С ростом хирального индекса  $n$  магнитный момент на атоме железа меняется немонотонно, так что для нанотрубки  $Fe_5@(6,3)$  магнитный момент достигает величины магнитного момента свободной линейной цепочки атомов железа.

Методами теорії функціонала щільності вперше виконано розрахунки електронної структури хіральних нанотрубок сімейства  $(n,n/2)$ , інкапсульованих лінійним ланцюжком атомів Fe. При інкапсулюванні первісно напівпровідникових нанотрубок  $Fe_5@(4,2)$ ,  $Fe_5@(6,3)$  та  $Fe_5@(8,4)$  ланцюжком атомів заліза усі нанотрубки стають металевими. У структурі  $Fe_5@(8,4)$  проводить тільки ланцюжок заліза. В усіх розглянутих нанотрубках зберігається велика енергія магнітної анізотропії, характерна для вільного лінійного ланцюжка атомів заліза. Із зростанням хірального індексу  $n$  магнітний момент на атомі заліза змінюється немонотонно, так що для нанотрубки  $Fe_5@(6,3)$  магнітний момент досягає величини магнітного моменту вільного лінійного ланцюжка атомів заліза.

PACS: 71.20.Tx Фуллерены и подобные материалы, интеркалированные соединения;  
73.22.-f Электронная структура наноразмерных материалов и родственных систем;  
75.30.Gw Магнитная анизотропия;  
61.48.De Структура углеродных нанотрубок, борсодержащих нанотрубок и других родственных систем.

Ключевые слова: электронная структура, углеродная нанотрубка, инкапсулирование, линейная цепочка железа, зонная структура, уровень Ферми, магнитный момент железа, соразмерность структур.

## Введение

Нанотрубки (НТ) и нанопровода — самые известные представители одномерных наноструктур [1]. Наличие у НТ внутренней полости позволяет создавать новые типы объектов, представляющие собой заполненные веществом НТ [2,3]. Из этого класса наноструктур повышенный интерес вызывают углеродные НТ, заполненные нанопроводами переходных металлов (ПМ).

Углеродная оболочка защищает нанопровод от внешних воздействий, а уникальные свойства нанопроводов переходных металлов предполагают их применение во многих областях современных нанотехнологий: спинтронике, магнитной записи, высокочувствительных магнитных сенсорах [4,5].

Экспериментально наиболее активно изучаются инкапсулированные многослойные нанотрубки как более доступный материал [6–10]. Основное внимание в этих

исследованиях уделяется изучению свойств нанокompозитов из этих трубок, т.е. рассматриваются коллективные макроскопические свойства ансамбля нанобъектов. Отметим, что многослойные трубки являются проводящими объектами. В то же время экспериментальные исследования инкапсулированных однослойных трубок достаточно ограничены [11,12]. В теоретических исследованиях обратная ситуация. Большинство первопринципных расчетов электронных и магнитных свойств проведено для однослойных углеродных НТ, инкапсулированных нанопроводами переходных металлов [13–21].

Использование НТ+ПМ в качестве элементов магнитной записи подразумевает наличие достаточной внутренней анизотропии. Между тем исследование намагниченности в ряде экспериментов [6,12] показывает, что НТ+ПМ демонстрирует суперпарамагнетизм, т.е. поведение, неприемлемое для запоминающего элемента. Одной из причин такого поведения, при существующих технологиях заполнения трубки металлом, является образование внутри трубки отделенных друг от друга кластеров металла, включающих десятки атомов [21]. Естественно, такие частицы являются классическими суперпарамагнетиками с полным отсутствием анизотропии. Очевидно, что простой анизотропии формы в этом случае оказывается недостаточно для образования петли гистерезиса. Одна из причин кластеризации — несоизмеримость постоянных решетки трубки и инкапсулированного нанопровода. В этом случае в процессе заполнения трубки металлом энергетически выгодно образование кластера вместо однородного нанопровода. Отметим, что, как показывают расчеты отдельно стоящих нанопроводов железа определенного сечения, они сами по себе обладают достаточно большой магнитной анизотропией [22,23]. Таким образом, при сохранении структуры нанопровода внутри трубки, т.е. в отсутствие кластеризации, можно было бы ожидать сохранения этих анизотропных свойств.

Возможное решение проблемы кластеризации — использование трубок с шагом, соизмеримым с постоянной решетки нанопровода. Однако при этом возникает ряд вопросов. Один из них — изменение проводящих свойств композитного объекта «трубка плюс нанопровод» по сравнению со свойствами начальной незаполненной трубки. Второй вопрос — сохранение анизотропных свойств нанопровода при переносе его в нанотрубку. В настоящей работе рассматривается вопрос об инкапсулировании одномерной цепочкой металла нанотрубок с соизмеримым шагом как простейший вариант решения проблемы кластеризации и суперпарамагнетизма.

Задача провести подобные расчеты с высокой точностью сложна, поскольку в общем случае, как указывалось выше, постоянные решетки вдоль оси трансляции углеродной НТ и нанопровода металла несоизмеримы.

Рассмотрим проблему на примере самых простых составляющих — углеродной НТ семейства «зигзаг» и линейной цепочки атомов Fe. Именно НТ «зигзаг», имеющая хиральные индексы  $(n,0)$ , часто используется в неэмпирических расчетах [16–19]. Число атомов в элементарной ячейке  $4n$ , а постоянная решетки вдоль оси трансляции  $c$  для всех НТ «зигзаг» одинакова и равна  $4,26 \text{ \AA}$ . Постоянная решетки вдоль оси линейной цепочки атомов железа (равновесное расстояние между атомами) равна  $2,26\text{--}2,25 \text{ \AA}$  [22,23]. При двух атомах железа в ячейке расстояние между ними будет  $2,13 \text{ \AA}$ , т.е. различие в постоянных более 6%. Снять проблему несоизмерности постоянных решетки НТ и нанопровода можно, увеличив во много раз элементарную ячейку по оси трансляции. При восьмикратном увеличении ячейки нанотрубки она содержит 15 атомов Fe и разница в постоянных решетки всего 0,5%. Если инкапсулированная НТ  $(6,0)$  содержит 26 атомов в ячейке (24 C и 2 Fe), то в элементарной ячейке модифицированной таким образом НТ будет уже 207 атомов (192 C и 15 Fe). Другая возможность решения проблемы несоизмерности постоянных решетки НТ и нанопровода состоит в выборе соответствующей хиральной НТ [1]. Для линейной цепочки атомов Fe довольно точно подходят углеродные хиральные НТ семейства  $(n,n/2)$ . Пять постоянных решетки линейной цепочки атомов железа составляют  $5 \cdot 2,26 \text{ \AA} = 11,3 \text{ \AA}$ , а постоянная решетки вдоль оси НТ для семейства  $(n,n/2)$  равна  $11,27 \text{ \AA}$ . Разница всего 0,27%. Цель настоящей работы — исследование структурных, электронных и магнитных свойств хиральных НТ семейства  $(n,n/2)$ , инкапсулированных линейной цепочкой атомов Fe.

### Модель и метод расчета

Для первопринципных расчетов с инкапсулированной линейной цепочкой атомов железа выбраны первые три НТ семейства с хиральными индексами  $(4,2)$ ,  $(6,3)$  и  $(8,4)$ . Они содержат 5 атомов железа и 56, 84, 112 атомов углерода в элементарной ячейке соответственно. Эти структуры изображены на рис. 1. Здесь же приведена структура инкапсулированной линейной

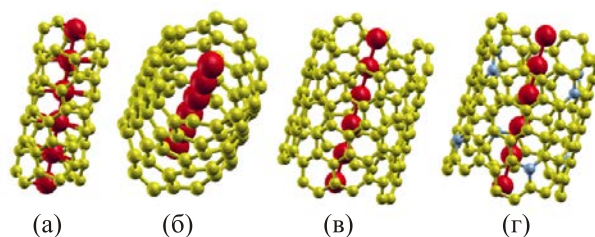


Рис. 1. НТ семейства  $(n,n/2)$ , инкапсулированные линейной цепочкой атомов Fe. Углеродные:  $n = 4$  (а); 6 (б); 8 (в). Углерод-азотные:  $n = 8, C_{104}N_8$  (г).

цепочкой атомов железа углеродной НТ (8,4) с частичным замещением углерода азотом. Восемь атомов углерода в элементарной ячейке замещены атомами азота, т.е. концентрация атомов азота 7%.

Электронное строение одномерных наноструктур рассчитывалось в рамках теории функционала плотности неэмпирическим методом LAPW (линеаризованных присоединенных плоских волн) — пакет WIEN2k [24]. Для обменно-корреляционного потенциала использовалось обобщенное градиентное приближение (GGA, generalized gradient approximation) в виде, предложенном Perdew–Burke–Ernzenhof [25]. Число разбиений в расчетах при интегрировании по неприводимой части зоны Бриллюэна выбиралось равным 36, а использованный максимальный волновой вектор в наборе плоских волн соответствует энергии 16 Ридб. В результате проведения самосогласованных расчетов находились оптимизированные позиции всех атомов и полная энергия системы, а затем рассчитывалась зонная структура соединения, плотность электронных и спиновых состояний и т.д. При этом уровень Ферми всегда принимался за точку отсчета. При оптимизации выполнялось требование, чтобы силы, действующие на атомы, были менее 0,1 эВ/Å. Атомы Fe соседних НТ находятся на расстоянии не менее 12 Å, поэтому их взаимодействием можно пренебречь.

### Структурные и электронные свойства

Рассмотрим идеальные хиральные НТ семейства (n,n/2). В табл. 1 приведены результаты первопринципных расчетов методами теории функционала плотности структурных и электронных свойств НТ семейства (n,n/2). Оптимизация структуры довольно сильно увеличивает поперечные размеры всех НТ, а не только НТ малого радиуса [26,27]. Интересно отметить, что радиус НТ «зигзаг» (12,0), близкий к радиусу НТ (8,4), практически не меняется при оптимизации — с 4,697 до 4,700 Å [28]. Таким образом, получается, что при

Таблица 1. Структурные параметры и электронные свойства НТ семейства (n,n/2)

НТ	$R_0$	$R$	$E_g$	$N(E_f)$
(4,2)	2,121	2,156	0,191	—
(6,3)	3,107	3,159	0,082	—
(8,4)	4,143	4,182	0,806	—
(8,4); C <sub>104</sub> N <sub>8</sub>	—	4,173	—	12,387

Примечание:  $R_0$ , Å — средний радиус НТ до оптимизации структуры, получающийся при сворачивании графитовой плоскости в соответствии с данными хиральными индексами;  $R$ , Å — средний оптимизированный радиус НТ;  $E_g$ , эВ — ширина запрещенной щели;  $N(E_f)$ , состояний/(эВ·ячейку) — полная электронная плотность состояний на уровне Ферми.

оптимизации структуры НТ важен не только радиус, но и хиральность НТ. Все рассматриваемые идеальные НТ семейства (n,n/2) являются полупроводниками (табл. 1, столбец 4), причем однозначной связи между  $E_g$  и  $R$  нет. При замещении углерода азотом (концентрация азота 7%) повышается уровень Ферми НТ, вследствие чего электронные зоны смещаются вниз и данная НТ становится металлом [29]. Проводимость НТ пропорциональна плотности электронных состояний на уровне Ферми. Эта характеристика приведена в табл. 1 для углерод-азотной НТ (8,4).

В табл. 2 представлены результаты первопринципных расчетов структурных и электронных свойств инкапсулированных линейной цепочкой атомов железа НТ семейства (n,n/2). Энергия связи НТ и линейной цепочки атомов железа определяется следующим образом:

$$E_b = \frac{E^{NT+Fe} - E^{NT}}{N_{Fe}} - E^{Fe},$$

где  $E^{NT+Fe}$  — энергия ферромагнитного состояния НТ, инкапсулированной цепочкой атомов железа;  $E^{NT}$  — энергия свободной НТ;  $N_{Fe}$  — количество атомов Fe, приходящееся на одну элементарную ячейку. При инкапсулировании НТ (4,2) линейной цепочкой атомов Fe энергия связи максимальна, увеличивается также на 0,087 Å радиус инкапсулированной нанотрубки. Все это свидетельствует о сильном взаимодействии между атомами железа в цепочке и углерода в НТ. Промежуточная ситуация наблюдается при инкапсулировании НТ (6,3). Радиус меняется слабо, а энергия связи все еще значительна. Слабое взаимодействие между атомами железа в цепочке и углерода в НТ получено в случае инкапсулирования железом НТ (8,4). Радиус НТ при инкапсулировании практически не меняется. Энергия связи минимальна, но состояние, безусловно, связанное. Частичное замещение углерода азотом несколько усиливает взаимодействие между атомами железа и

Таблица 2. Структурные и электронные характеристики НТ семейства (n,n/2), инкапсулированных линейными цепочками атомов Fe

Структура	$R$	$E_b$	$\Delta E_f$	$N(E_f)$	$N_{Fe}(E_f)$
Fe <sub>5</sub> @(4,2)	2,208	-1,486	2,241	5,449	60,61
Fe <sub>5</sub> @(6,3)	3,171	-1,241	0,917	21,758	89,11
Fe <sub>5</sub> @(8,4)	4,187	-0,480	0,862	9,134	100
Fe <sub>5</sub> @(8,4); C <sub>104</sub> N <sub>8</sub>	4,168	-0,522	0,292	13,634	69,61

Примечание:  $R$ , Å — средний оптимизированный радиус инкапсулированной линейной цепочкой железа НТ;  $E_b$ , эВ — энергия связи, приходящаяся на один атом металла;  $\Delta E_f$ , эВ — сдвиг уровня Ферми при инкапсулировании НТ цепочкой атомов Fe;  $N_{Fe}(E_f)$  — парциальная плотность электронных состояний Fe на уровне Ферми, % от полной электронной плотности инкапсулированной НТ.

атомами НТ. При инкапсулировании семейства НТ ( $n,n/2$ ) цепочкой атомов железа уровень Ферми всей системы повышается, а энергетические зоны состояний углерода опускаются вниз. Инкапсулированные НТ становятся металлическими, причем во всех случаях, кроме одного, проводит и цепочка железа, и поверхность НТ. Нетривиальная ситуация обнаруживается для структуры  $Fe_5@(8,4)$ . Энергетические зоны углерода вблизи уровня Ферми опускаются вниз примерно на 0,5 эВ, что меньше ширины запрещенной зоны  $E_g$  (0,806 эВ) неинкапсулированной НТ (8,4). Углеродная составляющая системы не проводит, а проводит только цепочка железа. Отметим, что  $N(E_F)$  для структуры  $Fe_5@(6,3)$  оказывается больше, чем у свободной линейной цепочки железа (18,499 состояний/(эВ·ячейку)).

### Магнитные свойства

Важным параметром структуры является спиновая поляризация электронов на уровне Ферми:

$$P = \frac{N_{\downarrow}(E_F) - N_{\uparrow}(E_F)}{N_{\downarrow}(E_F) + N_{\uparrow}(E_F)},$$

где  $N_{\downarrow}(E_F)$  и  $N_{\uparrow}(E_F)$  представляют полную плотность электронных состояний на уровне Ферми со спином соответственно вниз и вверх. Вычисленные значения  $P$  для всех рассматриваемых структур приведены в табл. 3. В ситуации сильного взаимодействия линейной цепочки атомов железа и углеродной НТ (случай  $Fe_5@(4,2)$ )  $P$  низкая, так же она невысока и для инкапсулированной углерод-азотной НТ (8,4). В остальных случаях  $P$  больше 0,8, а для  $Fe_5@(8,4)$  приближается к значению для  $Fe_1$  [22]. Для объяснения значений магнитного момента на Fe (табл. 3, столбец 3) необходимо рассмотреть во всех исследуемых структурах плотность  $d$ -состояний Fe, которая представлена на рис. 2. Существенное расширение энергетического интервала  $d$ -состояний Fe (в особенности для спина вниз) в структуре  $Fe_5@(4,2)$  по сравнению с  $d$ -состояниями Fe в свободной цепочке железа (рис. 2(а)) приводит к уменьшению магнитного момента. Можно сказать, что происходит гибридизация  $d$ -состояний Fe с  $p$ -состояниями углерода. То есть близость поверхности НТ к атомам цепочки железа подавляет магнитный момент на Fe. Аналогичные результаты получены и авторами работ [14,16,19]. Для структур  $Fe_5@(6,3)$  и  $Fe_5@(8,4)$ , соответственно рис. 2(б) и (в), энергетические интервалы  $d$ -состояний Fe в инкапсулированном и свободном виде практически не отличаются, поэтому значения магнитных моментов близки. Отличие в положении пиков  $d$ -состояний Fe связано с различной пространственной симметрией структур. Замещение 7% углерода азотом приводит к небольшому уменьшению магнит-

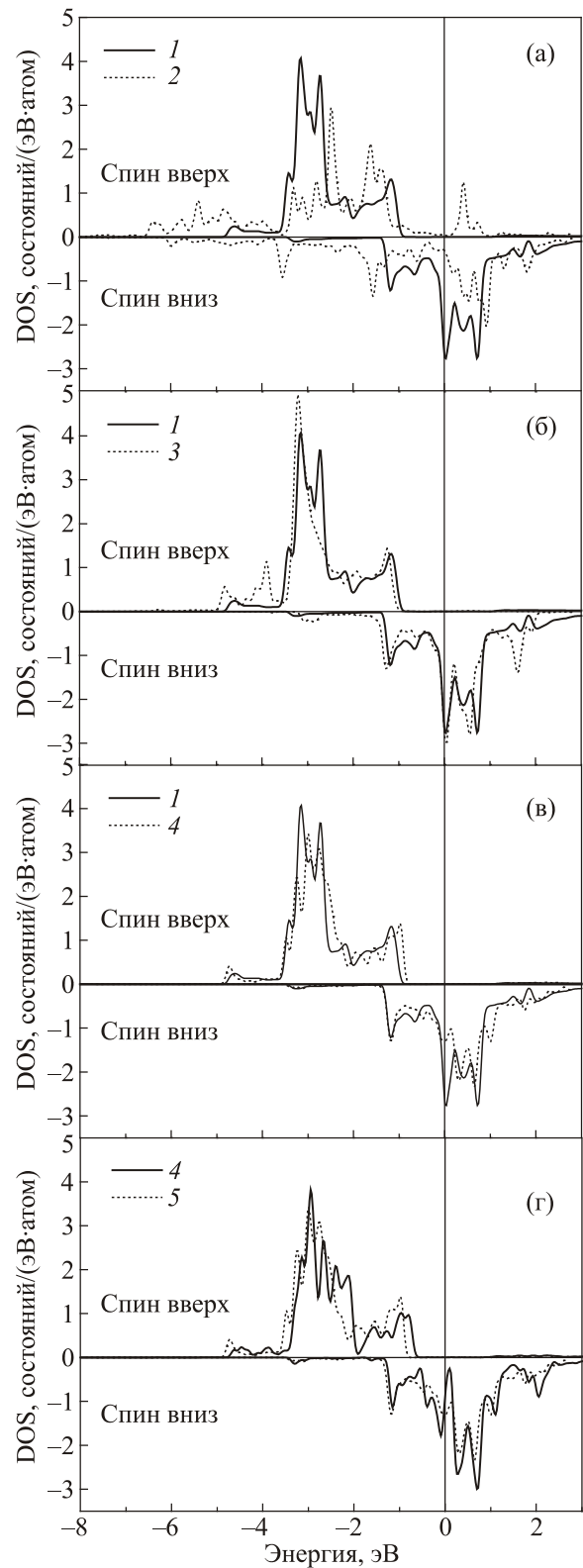


Рис. 2. Полная плотность  $d$ -состояний Fe (DOS) в различных структурах:  $Fe_1$  (1);  $Fe_5@(4,2)$  (2);  $Fe_5@(6,3)$  (3);  $Fe_5@(8,4)$  (4);  $Fe_5@(8,4)$ ;  $C_{104}N_8$  (5).

ного момента на Fe. Различия в графиках плотности  $d$ -состояний Fe при замещении углерода азотом показаны на рис. 2(г).

Таблица 3. Магнитные свойства НТ семейства  $(n,n/2)$ , инкапсулированных линейными цепочками атомов Fe

Структура	$P$	$\mu_{Fe}$	$\mu_C; \mu_N$	$E^{el}$	$E^d$	$E_A$
Fe5@(4,2)	0,333	2,215	0,007	-1,422	0,163	-1,259
Fe5@(6,3)	0,815	3,038	0,002	-6,579	0,309	-6,270
Fe5@(8,4)	0,898	2,990	0,0002	-7,278	0,299	-6,979
Fe5@(8,4); C <sub>104</sub> N <sub>8</sub>	0,560	2,912	0,0009; 0,0036	-7,338	0,284	-7,054
Fe <sub>1</sub>	0,949	2,980	—	-8,530	0,297	-8,233

Примечание: Fe<sub>1</sub> — линейная цепочка атомов Fe;  $\mu_{Fe}$ , в единицах  $\mu_B$  — средний магнитный момент на атоме Fe;  $\mu_C$ ,  $\mu_N$ , в единицах  $\mu_B$  — средние магнитные моменты на атомах C, N данной НТ;  $E_A$ ,  $E^{el}$ ,  $E^d$  в мэВ.

Энергия магнитной анизотропии инкапсулированной НТ состоит из электронного вклада и вклада, зависящего от энергии диполь-дипольного взаимодействия магнитных моментов атомов:

$$E_A = E^{el} + E^d.$$

Электронная часть магнитной анизотропии  $E^{el}$  определяется как разница полных энергий инкапсулированных НТ с намагниченностью вдоль оси НТ и перпендикулярно оси в расчете на один атом Fe. Значения электронной части энергии анизотропии  $E^{el} = E^{\parallel} - E^{\perp}$  приведены в табл. 3. Положительное значение  $E_A$  показывает, что ось НТ является легкой осью намагниченности. Соответственно, отрицательное значение  $E_A$  означает, что плоскость легкого намагничивания перпендикулярна оси НТ. Энергия магнитной анизотропии в большей степени, чем магнитный момент, зависит от радиуса инкапсулированной железом НТ. Энергия анизотропии НТ (4,2), инкапсулированной цепочкой атомов железа, незначительна — всего 15% от энергии анизотропии свободной цепочки атомов Fe. Для инкапсулированной НТ (6,3) сохраняется 76% этой энергии. Но и для инкапсулированных цепочкой атомов железа НТ наибольших радиусов энергия анизотропии не достигает значений энергии анизотропии свободной цепочки атомов Fe.

Распределение спиновой плотности инкапсулированных углеродных НТ семейства  $(n,n/2)$  приведено на рис. 3. Во всех случаях положительная спиновая плотность быстро падает вблизи ядра железа, а дальше находится область отрицательной спиновой плотности. Можно утверждать, что магнитный момент Fe хорошо локализован на атоме железа. Рядом с горизонтальной плоскостью Fe (рис. 3), выше и ниже нее на расстоянии 0,25 Å, находятся: 4 (а); 6 (б); 8 (в) атомов углерода. Взаимодействие этих атомов углерода с атомом железа отражено в линиях равной плотности вблизи углов на рис. 3(а). Кроме того, значительную область рис. 3(а) занимает отрицательная спиновая плотность. На рис. 3(б) и (в) области отрицательной спиновой плотности су-

щественно уменьшаются. На этих рисунках в распределении спиновой плотности очень слабо отражается наличие близких к горизонтальной плоскости Fe атомов углерода.

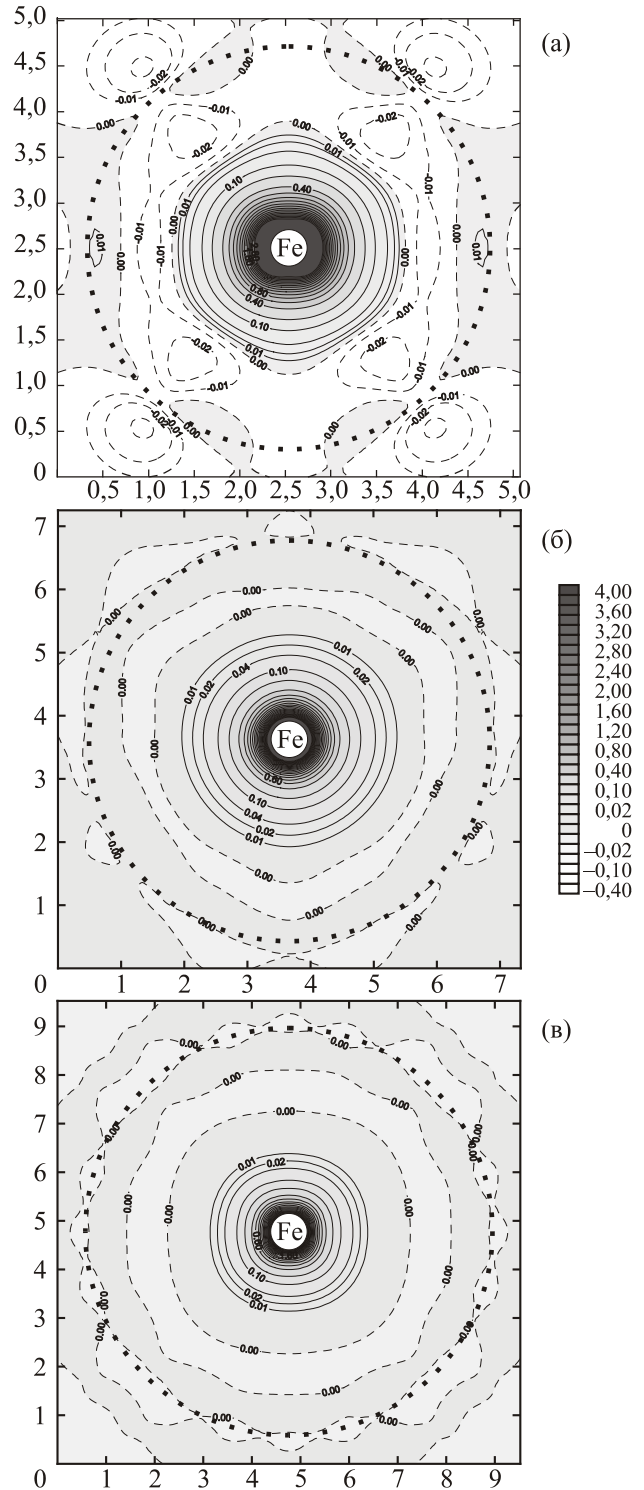


Рис. 3. Распределение спиновой плотности НТ семейства  $(n,n/2)$ , инкапсулированных линейной цепочкой атомов Fe. Поперечный разрез, проходящий через атом Fe (в  $e/\text{Å}^3$ ):  $n = 4$  (а); 6 (б); 8 (в). Окружность, проведенная пунктиром, показывает примерное расположение углеродной НТ.

## Выводы

1. Все три исследуемые хиральные углеродные НТ семейства  $(n,n/2)$  являются полупроводниками. При инкапсулировании цепочкой атомов железа композитный объект НТ+ПМ становится проводящим. Во всех случаях, кроме  $\text{Fe}_5@(\text{8,4})$ , проводит и цепочка железа, и поверхность НТ. В структуре  $\text{Fe}_5@(\text{8,4})$  углеродная НТ не проводит, а проводит только цепочка железа.

2. Плотность электронных состояний на уровне Ферми для структуры  $\text{Fe}_5@(\text{6,3})$  оказывается на 18% больше, чем у свободной линейной цепочки железа, в отличие от  $\text{Fe}_5@(\text{4,2})$  и  $\text{Fe}_5@(\text{8,4})$ , в которых плотность электронных состояний ниже.

3. С увеличением радиуса НТ + ПМ локальный магнитный момент на атоме железа растет немонотонно, так что при радиусе 3,171 Å для  $\text{Fe}_5@(\text{6,3})$  магнитный момент достигает величины, близкой к локальному магнитному моменту железа свободной линейной цепочки Fe.

4. Частичное замещение углерода азотом в НТ, инкапсулированной линейной цепочкой атомов железа (концентрация азота 7%  $\text{Fe}_5@(\text{8,4})$ :  $\text{C}_{104}\text{N}_8$ ), незначительно меняет магнитные параметры системы.

5. Большая энергия магнитной анизотропии, характерная для свободной линейной цепочки атомов железа, сохраняется во всех рассмотренных НТ+ПМ, но с уменьшением радиуса инкапсулированной НТ она уменьшается вследствие гибридизации состояний углерода и железа.

Работа выполнена при поддержке программы «Фундаментальные проблемы наноструктурных систем, наноматериалов, нанотехнологий» (грант № 91/13-Н), а также Государственной программы внедрения и использования грид-технологий (грант № 232). Расчеты проведены на грид-кластере ДонФТИ НАНУ.

1. *Carbon Nanotubes: Synthesis, Structure, Properties, and Applications*, M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and P. Avouris (eds.), Springer, Berlin (2001).
2. П.Н. Дьячков, *Электронные свойства и применение нанотрубок*, БИНОМ, Москва, Лаборатория знаний (2011).
3. А.В. Елецкий, *УФН* **177**, 2003 (2007).
4. К. Svensson, Н. Olin, and Е. Olsson, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 145901 (2004).
5. N.Y. Jin-Phillipp and M. Puhle, *Phys. Rev. B* **70**, 245421 (2004).
6. G.E. Grechnev, V.A. Desnenko, A.V. Fedorchenko, A.S. Panfilov, L.Yu. Matrui, Yu.I. Prylutskyy, M.I. Grybova, U. Ritter, P. Scharff, and Yu.A. Kolesnichenko, *Fiz. Nizk. Temp.* **36**, 1347 (2010) [*Low Temp. Phys.* **36**, 1086 (2010)].
7. S. Karmakar, S.M. Sharma, P.V. Teredesai, and A.K. Sood, *Phys. Rev. B* **69**, 165414 (2010).
8. M.N. Ou, T.J. Yang, and Y.Y. Chen, *Chin. J. Phys.* **47**, 848 (2009).

9. Т.А. Лень, Л.Ю. Мацуй, И.В. Овсиенко, Ю.И. Прилуцкий, В.В. Андриевский, И.Б. Беркутов, Г.Е. Гречнев, Ю.А. Колесниченко, *ФНТ* **37**, 1027 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 819 (2011)].
10. L. Wang, H.W. Zhang, Y.G. Zheng, J.B. Wang, and Z.Q. Zhang, *J. Appl. Phys.* **103**, 083519 (2008).
11. Y. Li, T. Kaneko, T. Ogawa, M. Takahashi, and R. Hatakeyama, *Jpn. J. Appl. Phys.* **47**, 2048 (2008).
12. Antonio Briones-Leon, Paola Ayala, Xianjie Liu, Kazuhiro Yanagi, Eugen Weschke, Michael Eisterer, Hua Jiang, Hiro-michi Kataura, Thomas Pichler, and Hidetsugu Shiozawa, *Phys. Rev. B* **87**, 195435 (2013).
13. Y.J. Kang, J. Choi, C.Y. Moon, and K.J. Chang, *Phys. Rev. B* **71**, 115441 (2005).
14. Y.J. Kang and K.J. Chang, *Physica B* **376–377**, 311 (2006).
15. E.M. Diniz, R.W. Nunes, H. Chacham, and M.S.C. Mazzoni, *Phys. Rev. B* **81**, 153413 (2010).
16. M. Weissmann, G. Garsia, M. Kiwi, R. Ramirez, and C.C. Eu, *Phys. Rev. B* **73**, 125435 (2006).
17. Y. Sun, X. Yang, and J. Ni, *Phys. Rev. B* **76**, 035407 (2007).
18. S.F. Wang, Y. Zhang, L.Y. Chen, J.M. Zhang, and K.W. Xu, *Phys. Status Solidi A* **208**, 97 (2011).
19. Y. Xie, J.M. Zhang, and Y.P. Huo, *Eur. Phys. J. B* **81**, 459 (2011).
20. V.V. Ivanovskaya, C. Köhler, and G. Seifert, *Phys. Rev. B* **75**, 075410 (2007).
21. F.I. Horga, A. Mañanes, M.J. López, and J.A. Alonso, *Phys. Rev. B* **87**, 085402 (2013).
22. В.Г. Бутько, А.А. Гусев, Т.Н. Шевцова, Ю.Г. Пашкевич, *ФНТ* **38**, 1433 (2012) [*Low Temp. Phys.* **38**, 1129 (2012)].
23. J.C. Tung and G.Y. Guo, *Phys. Rev. B* **76**, 094413 (2007).
24. P. Blaha, K. Schwarz, P.I. Sorantin, and S.B. Trickey, *Comp. Phys. Commun.* **59**, 399 (1990).
25. J.P. Perdew, S. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
26. В.Г. Бутько, А.А. Гусев, Т.Н. Шевцова, Ю. Г. Пашкевич, *ФНТ* **35**, 183 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 137 (2009)].
27. H.J. Liu and C.T. Chan, *Phys. Rev. B* **66**, 115416 (2002).
28. В.Г. Бутько, А.А. Гусев, Т.Н. Шевцова, Ю. Г. Пашкевич, *ФНТ* **35**, 1133 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 883 (2009)].
29. В.Г. Бутько, А.А. Гусев, Т.Н. Шевцова, Ю. Г. Пашкевич, *ФНТ* **37**, 1282 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 1021 (2011)].

## Structural, electronic and magnetic properties of chiral nanotubes, encapsulated with linear chain of iron

V.G. Boutko, A.A. Gusev, T.N. Shevtsova, and Yu.G. Pashkevich

Density functional calculations of the electronic structure of a Fe linear chain encapsulated inside single-wall chiral carbon nanotubes with the chiral indices  $(n,n/2)$  were performed for the first time. It is

found that initially semiconducting nanotubes with  $\text{Fe}_5@(4,2)$ ,  $\text{Fe}_5@(6,3)$  and  $\text{Fe}_5@(8,4)$  become conductive after the encapsulation. In the case of  $\text{Fe}_5@(8,4)$  only the iron chain is conductive. High magnetic anisotropy remains almost similar to that of a single chain of iron atoms for all nanotubes under consideration. As the chiral index  $n$  is increased the magnetic moment on iron varies nonmonotonically, so that for the nanotube with  $\text{Fe}_5@(6,3)$  it reaches the magnitude of the magnetic moment in the single linear chain of iron atoms.

PACS: 71.20.Tx Fullerenes and related materials; intercalation compounds;  
**73.22.-f** Electronic structure of nanoscale materials and related systems;  
75.30.Gw Magnetic anisotropy;  
61.48.De Structure of carbon nanotubes, boron nanotubes, and other related systems.

Keywords: electronic structure, carbon nanotube, encapsulation, linear chain of iron, band structure, the Fermi level, the magnetic moment of iron, commensurability of structures.