

УДК 538.91

В. Г. Бутько, А. А. Гусев

Государственное учреждение «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина»
283114, г. Донецк, ул. Р. Люксембург, 72

МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА ДИАМЕТРА НАНОПРОВОДА ЖЕЛЕЗА. СТРУКТУРНЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА

V. G. Boutko, A. A. Gusev

Public institution «A.A. Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering»
283114, с. Donetsk, R. Luxembourg str., 72

MODELING GROWTH OF THE DIAMETER IN IRON NANOWIRE. STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES

В. Г. Бутько, О. А. Гусев

Державна установа «Донецкий физико-технічний інститут ім.О.О. Галкіна»
283114, м. Донецьк, вул. Р. Люксембург, 72

МОДЕЛЮВАННЯ РОСТУ ДІАМЕТРУ НАНОДРОТІВ ЗАЛІЗА. СТРУКТУРНІ ТА ЕЛЕКТРОННІ ВЛАСТИВОСТІ

Выполнены первопринципные расчеты электронной структуры нанопроводов железа с поперечными размерами до 12.6Å. В поперечном сечении структура нанопроводов с ростом диаметра приближается к структуре объемно-центрированного кристалла. Близость электронной структуры нанопровода и объемного кристалла определяется, характеризующим нанопровод, средним количеством ближайших соседей.

Ключевые слова: теория функционала плотности, электронная структура, нанопровод, уровень Ферми.

The first-principle calculations of the electronic structure of iron nanowires with transverse dimensions up to 12.6Å were performed. In cross section, the structure of nanowires with increasing diameter approaches the structure of a body-centered crystal. The proximity of the electronic structure of the nanowire and the bulk crystal is determined, characterizing the nanowire, by the average number of nearest neighbors.

Key words: density functional theory, electron structure, nanowire, Fermi level.

Виконано першопринципові розрахунки електронної структури нанодротів заліза з поперечними розмірами до 12.6Å. У поперечному перерізі структура нанодротів з ростом діаметра наближається до структури об'ємно-центрованого кристала. Близькість електронної структури нанодрота і об'ємного кристала визначається, що характеризує нанодріт, середньою кількістю найближчих сусідів.

Ключові слова: теорія функціонала щільності, електронна структура, нанодріт, рівень Фермі.

Введение

Нанопровода (НП) переходных металлов продолжают привлекать повышенное внимание. Их уникальные физико-химические свойства представляют сами по себе большой научный интерес. Кроме того, НП переходных металлов – главные кандидаты на применение во многих областях современных нанотехнологий: спинтронике, магнитной записи, высокочувствительных магнитных сенсорах и т.д. [1], [2]. НП переходных металлов интенсивно исследовались как экспериментально [3-6], так и теоретически [7-19]. Среди последних работ чаще всего исследовались НП переходных металлов, находящихся внутри нанотрубок [7-12].

Также немало работ посвящено проблеме взаимодействия НП с кристаллической подложкой [13], [14]. В изучении же свойств именно свободно стоящих НП переходных металлов на наш взгляд есть некоторые пробелы. Наряду с тщательными исследованиями НП в форме линейной и зигзаг атомных цепочек [15], [16] и работами по переходу от линейных форм НП к трехмерным (от НП к наностержню) [17], [18], практически нет исследований зависимости структурных и электронных свойств НП от его диаметра и сравнения этих свойств с аналогичными в объемном кристалле. Можно отметить только работу [19], но в ней исследовались в основном различные режимы электронной поляризации НП Co в зависимости от диаметра.

Поэтому есть смысл провести тщательные расчеты свойств свободно стоящих НП одного из переходных металлов в зависимости от его диаметра. Таким образом, **целью настоящей работы** является систематическое изучение структурных и электронных свойств НП железа различных поперечных размеров (от минимального, соответствующего одноатомной цепочке, до 12.6\AA).

Модель и метод расчета

Одномерные кристаллические наноструктуры построены на основе α -фазы Fe (ОЦК структура). Ось трансляции соответствует направлению $(0,0,1)$. Структуры НП различных поперечных размеров приведены на рис. 1.

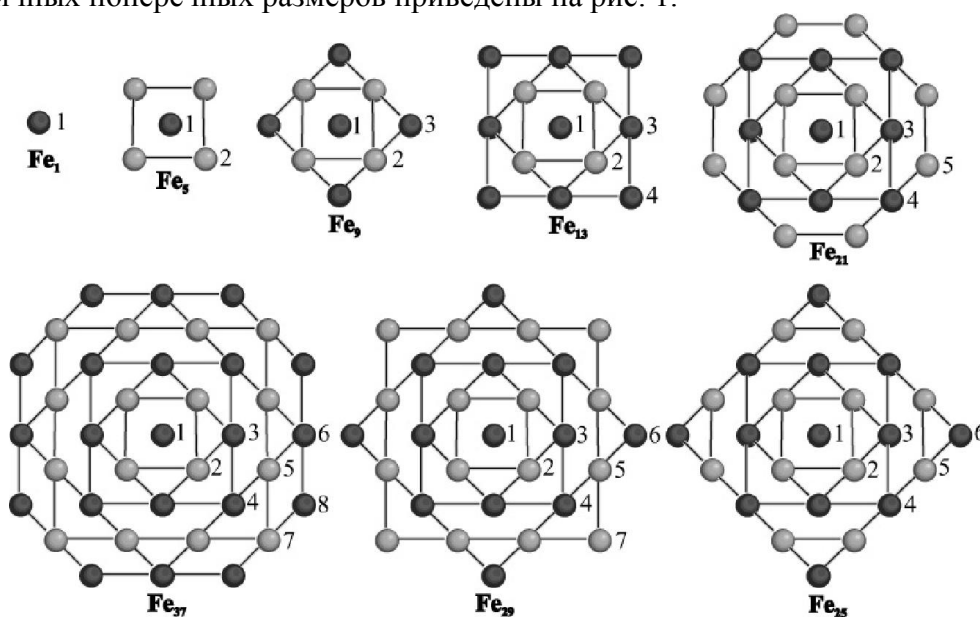


Рисунок 1 – Структура НП различных поперечных размеров.
Атомы Fe первого слоя темные, второго – светлые. 1 – 8 – номера оболочек

Номера атомов на рис. 1 соответствуют номерам оболочек. Все атомы Fe, принадлежащие одной оболочке, находятся на одинаковом расстоянии от оси НП. Структуру из n атомов железа в ячейке будем обозначать как Fe_n .

Электронное строение одномерных наноструктур рассчитывали в рамках теории функционала плотности неэмпирическим методом LAPW (линеаризованных присоединенных плоских волн) – пакет WIEN2k [20]. Для обменно-корреляционного потенциала использовали обобщенное градиентное приближение (GGA – generalized gradient approximation) в виде, предложенном Perdew–Burke–Ernzenhof [21]. Число разбиений при интегрировании по неприводимой части зоны Бриллюэна в расчетах выбирали равным 36, максимальный волновой вектор в наборе плоских волн соответствовал энергии 16 Ry. В результате проведения самосогласованных расчетов находили оптимизированные позиции всех атомов и полную энергию системы, а затем рассчитывали зонную структуру соединения, плотность электронных состояний (ПЭС) и т.д. При оптимизации выполняли требование, чтобы силы, действующие на атомы, были меньше, чем 0.1 eV/\AA . Поскольку атомы Fe соседних НП находятся на расстоянии не менее 10 \AA , их взаимодействием можно пренебречь.

Структурные свойства

В объемно-центрированном кристалле каждый атом имеет 8 ближайших и 6 вторых соседей. Именно средним числом первых и вторых соседей можно характеризовать степень близости одномерной структуры к объемной. В табл. 1 приведены данные для рассматриваемых одномерных нанокристаллов.

Таблица 1 – Количественные характеристики структур элементарных ячеек одномерных НП Fe_n

Структура	Количество атомов		Количество соседей	
	внутренних	внешних	первых	вторых
Fe_1	-	1	2	2
Fe_5	1	4	3.2	3.6
Fe_9	5	4	5.33	3.77
Fe_{13}	5	8	4.92	4.46
Fe_{21}	9	12	6.10	4.67
Fe_{25}	13	12	6.40	4.56
Fe_{29}	13	16	6.07	4.76
Fe_{37}	21	16	6.49	5.03
ОЦК	1	0	8	6

Количество соседей и первых, и вторых растет по мере увеличения поперечных размеров нанопровода, но их значения для предельного из рассматриваемых случаев (37 атом в элементарной ячейке) еще существенно отличаются от кристаллических (табл. 1, последняя строка). Уменьшение числа первых соседей при переходе от 9 к 13 и от 25 к 29 атомам элементарной ячейки объясняется тем, что при этом добавляются только внешние атомы Fe. Заметим, что количественные характеристики НП Fe_{37} вполне сопоставимы с количественными характеристиками ОЦК Fe.

В табл. 2 приведены результаты оптимизации одномерных кристаллических НП Fe. В последней строчке приведены данные для ОЦК Fe.

Таблица 2 – Оптимизированные структурные параметры НП Fe

Структура	C	L ₁	L ₂	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	R ₆	R ₇	R ₈
Fe ₁	2.26									
Fe ₅	2.64	2.34	2.73	1.93						
Fe ₉	2.66	2.44	2.90	2.06	2.88					
Fe ₁₃	2.74	2.41	2.77	1.96	2.90	3.82				
Fe ₂₁	2.71	2.44	2.86	2.03	2.89	4.07	4.53			
Fe ₂₅	2.74	2.44	2.87	2.06	2.87	4.10	4.53	5.66		
Fe ₂₉	2.74	2.44	2.84	2.00	2.91	3.99	4.62	5.74	5.85	
Fe ₃₇	2.75	2.45	2.84	2.01	2.82	4.02	4.51	5.77	6.05	6.32
ОЦК Fe	2.85	2.47	2.85	2.02	2.85	4.02	4.51	5.70	6.05	6.37

Примечание: C – постоянная решетки вдоль оси трансляции; L_n – среднее расстояние между соседями: n = 1 – первыми, n = 2 – вторыми, Å; R_n – расстояние от оси трансляции до атома оболочки n, Å

Столбец 3 – это средняя длина связей между ближайшими атомами (они из разных слоев элементарной ячейки); 4 – это средняя длина связей между вторыми соседями. Эти величины с ростом n становятся очень близкими к аналогичным в кристалле. Почти все радиусы оболочек отличаются от аналогичных в кристалле, но с ростом поперечных размеров НП различия между ними уменьшаются, и для структуры Fe₃₇ большинство расстояний становятся практически равными кристаллическим. Постоянная решетки C тоже увеличивается с ростом n, но значительно медленнее, чем величины, характеризующие поперечные размеры НП, и еще далека от кристаллической.

Электронные свойства

Важной характеристикой электронной структуры НП, определяющей, является ли система связанной, представляется энергия связи E_b (табл. 3).

Таблица 3 – Электронные свойства НП Fe

Структура	E _b	N _{tot} (E _f)	P
Fe ₁	-1.586	3.71	0.96
Fe ₅	-3.348	1.66	0.73
Fe ₉	-3.954	0.73	0.58
Fe ₁₃	-4.010	0.98	0.66
Fe ₂₁	-4.314	1.02	0.30
Fe ₂₅	-4.348	0.98	0.12
Fe ₂₉	-4.348	1.12	0.45
Fe ₃₇	-4.477	1.10	0.06
ОЦК Fe	-5.025	1.05	-0.64

Примечание: E_b – энергия связи, приходящаяся на один атом, eV; N_{tot}(E_f) – полная ПЭС на уровне Ферми, states/(eV·cell·atom); P – степень спиновой поляризации электронов

Для линейной цепочки (Fe_1) она очень мала по сравнению с энергией связи кристалла, для остальных НП – энергия связи все еще меньше, но сравнима с кристаллической. Для НП Fe_{37} – энергия связи составляет почти 90% от энергии связи кристалла.

Плотность электронных состояний для всех структур Fe_n и ОЦК железа приведена на рис. 2. Она полностью определяется d электронами Fe.

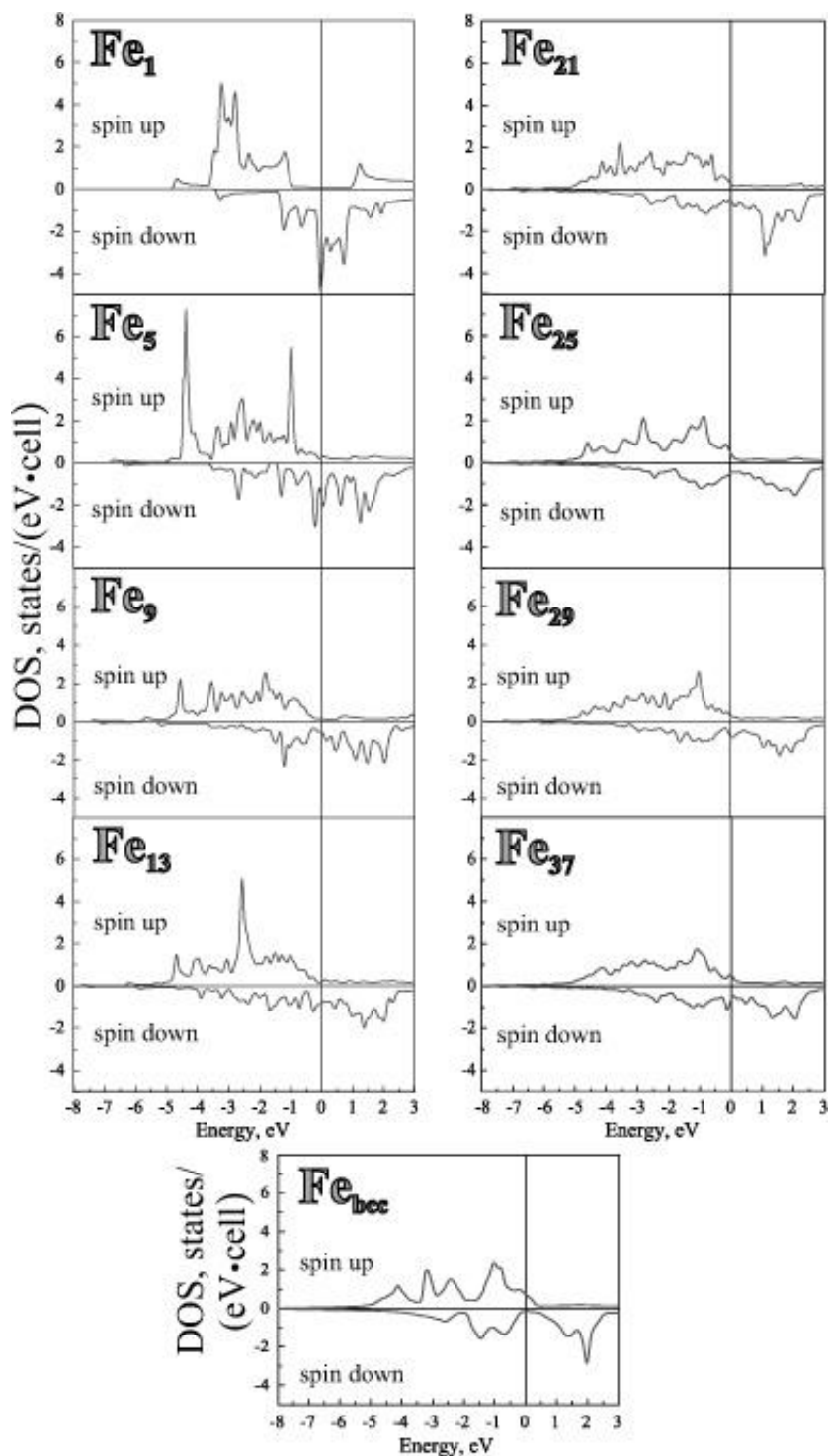


Рисунок 2 – Полная плотность электронных состояний, рассматриваемых НП и ОЦК Fe

Если для структур Fe₁ и Fe₅ плотность состояний явно не имеет характерных особенностей таковой для кристалла, то по мере увеличения поперечных размеров НП плотность состояний становится вполне сопоставимой с кристаллической. А для структур Fe₂₉ и Fe₃₇ рельеф плотности состояний отражает основные черты плотности состояний в кристалле.

Как известно, проводимость системы пропорциональна полной плотности электронных состояний на уровне Ферми $N_{\text{tot}}(E_f)$. Значения $N_{\text{tot}}(E_f)$ для различных НП также приведены в табл. 3. Видно, что $N_{\text{tot}}(E_f)$ для НП железа с ростом числа атомов в элементарной ячейке стремится к $N_{\text{tot}}(E_f)$ кристалла. Характерным параметром электронной структуры является степень спиновой поляризации электронов на уровне Ферми. Она определяется как

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

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. Следует отметить два существенных обстоятельства: во-первых, спиновая поляризация НП Fe положительная, а кристалла – отрицательная; во-вторых, степень спиновой поляризации НП с ростом n падает, и для структуры Fe₃₇ она становится почти нулевой.

Распределение полной электронной плотности для структуры Fe₃₇ представлено на рис. 3. Вокруг внешних атомов Fe распределение электронной плотности Fe (оболочки 6, 7 и 8) существенно отличается от распределения плотности вокруг внутренних атомов, которые представляются почти эквивалентными.

Рис. 3 позволяет наглядно увидеть различия в поперечных слоях в положениях соответствующих один другому атомов НП Fe₃₇ и ОЦК железа. Можно сказать, что формируется сердцевина (оболочки 1-4), где положения атомов нанопровода и кристалла практически совпадают. Для оболочек 5, 6 и 7 отклонения положений атомов НП от атомов кристалла минимальны и только для оболочки 8 они становятся довольно заметными. В целом, в поперечном сечении структура НП Fe₃₇ совпадает со структурой ОЦК Fe.

Заключение

В поперечном сечении структура нанопровода Fe₃₇ практически совпадает со структурой ОЦК Fe.

Постоянная решетки C увеличивается с ростом n , но значительно медленнее, чем величины, характеризующие поперечные размеры нанопровода, и еще далека от кристаллической.

Знак и величина степени спиновой поляризации электронов на уровне Ферми полностью определяется соотношением координационных чисел по оболочкам НП металла.

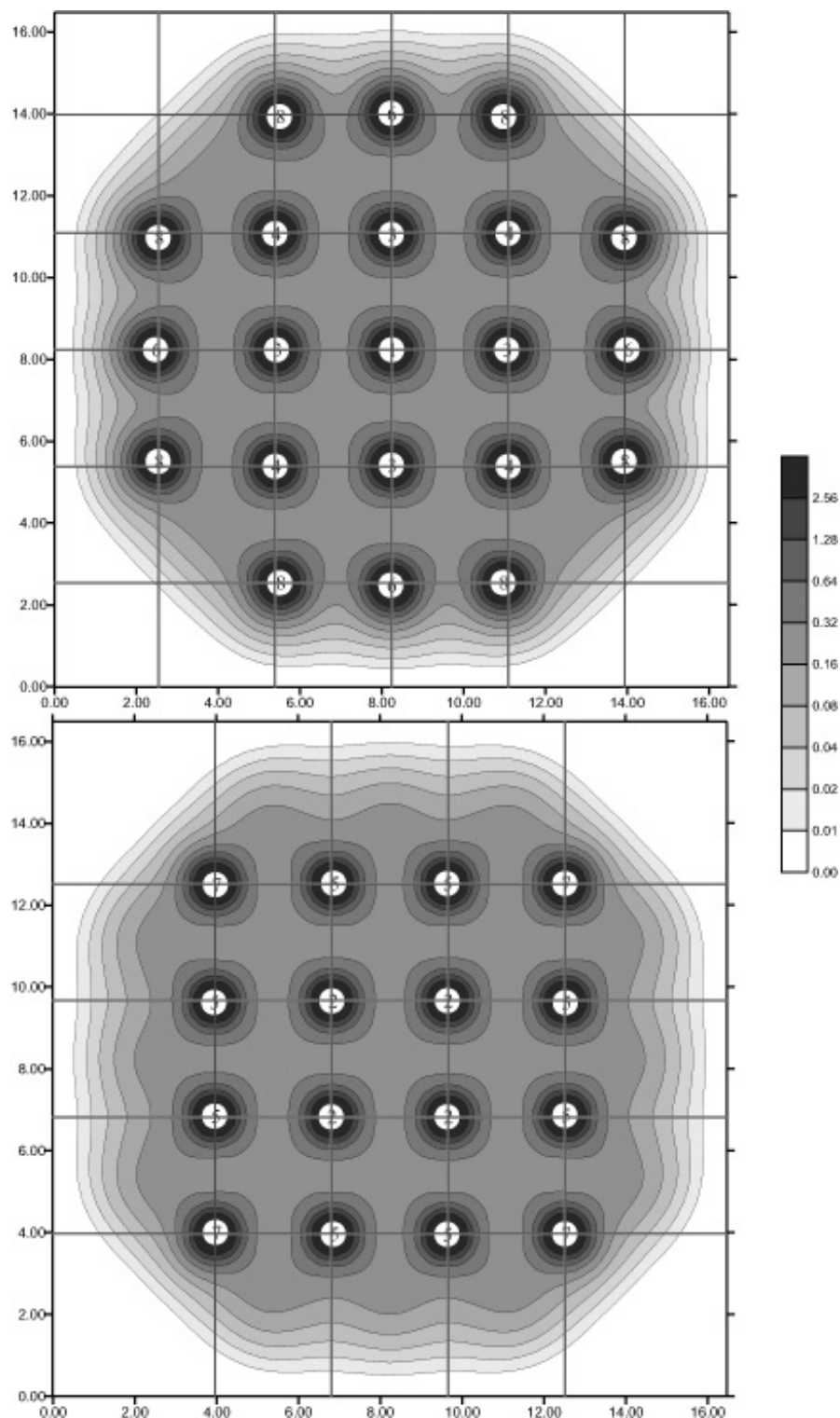


Рисунок 3 – Распределение полной электронной плотности в поперечных плоскостях НП Fe₃₇. Вверху – слой 1, внизу – слой 2. В единицах $e/\text{Å}^3$. Внешний контур соответствует электронной плотности $0.01 e/\text{Å}^3$, в каждом следующем контуре плотность увеличивается в 2 раза. На рисунки наложена сетка, узлы которой соответствуют положениям атомов ОЦК Fe.

Список литературы

1. Svensson K. Nanopipettes for metal transport [Текст] / K. Svensson, H. Olin, E. Olsson // Phys. Rev. Lett. – 2004. – V. 93. – P. 145901.
2. Jin-Phillipp N. Y. Carbon nanotube/metal interface studies by cross-sectional transmission electron microscopy [Текст] / N. Y. Jin-Phillipp, M. Puhle // Phys. Rev. B. – 2004. – V. 70. – P. 245421.
3. Varner J. H. Structural transformations of carbon chains inside nanotubes [Текст] / J. H. Warner, M. H. Rummeli, A. Bachmatiak, B. Büchner // Phys. Rev. B. – 2010. – V. 81. – P. 155419.
4. Guerret-Piécourt C. Relation between metal electronic structure and morphology of metal compounds inside carbon nanotubes [Текст] / C. Guerret-Piécourt, Y. Le Bouar, A. Loiseau, H. Pascard // Nature. – 1994. – V. 372. – P. 761.
5. Grobert N. Enhanced magnetic coercivities in Fe nanowires [Текст] / N. Grobert, W. K. Hsu, Y. Q. Zhu, J. P. Hare, H. W. Kroto, D. R. M. Walton, M. Terrones, H. Terrones, P. Pedish, M. Ruhle, R. Escudero, F. Moralez // Appl. Phys. Lett. – 1999. – V. 75. – P. 3363.
6. Karmakar S. Pressure- induced phase transition in iron – filled carbon nanotubes: X-ray diffraction studies [Текст] / S. Karmakar, S.M. Sharma, P.V. Teredesai, A.K. Sood // Phys. Rev.B – 2010. – V. 69. – P. 165414.
7. Weissmann M. Theoretical study of carbon – coated iron nanowires [Текст] / M. Weissmann, G. Garsia, M. Kiwi, R. Ramirez // Phys. Rev. B. – 2004. – V.70. – P. 201401(R).
8. Kang Y. J. Electronic and magnetic properties of single – wall carbon nanotubes filled with iron atoms [Текст] / Y. J. Kang, J. Choi, C. Y. Moon, K. J. Chang // Phys. Rev. B. – 2005. – V. 71. – P. 115441.
9. Mao Y.-L. First principles study of transition – metal – doped single – walled carbon nanotubes [Текст] / Y.-L. Mao, X.-H. Yan and Y. Xiao // Nanotechnology. – 2005. – V. 16. – P.3092–3096.
10. Weissmann M. Theoretical study of iron filled carbon nanotubes [Текст] / M. Weissmann, G. Garsia, M. Kiwi, R. Ramirez, C. C. Eu // Phys. Rev. B. – 2006. – V. 73. – P.125435.
11. Jang Y.-R. Magnetism of linear Fe, Co, and Ni nanowires encapsulated in zigzag ($n,0$) carbon nanotubes (CNT) with $n = 5$ to 9: A first-principles study [Текст] /Y.-R. Jang and J.I. Lee // Phys. Stat. Sol. (b). – 2007. – V. 244. – P. 4407-4410.
12. Kang Y. J. The electronic and magnetic properties of carbon nanotubes interacting with iron atoms [Текст] / Y. J. Kang, K. J. Chang // Physica B. – 2006. – V. 376-377. – P. 311–315.
13. Mazzarello R. Connection between magnetism and structure in Fe double chains on the Ir(100) surface [Текст] / R. Mazzarello, E. Tosatti // Phys. Rev. B. – 2009. – V. 79 – P. 134402.
14. Tung J. C. An *ab initio* study of the magnetic and electronic properties of Fe, Co, and Ni nanowires on Cu(001) surface [Текст] / J. C. Tung, G. Y. Guo // Computer Physics Communications. – 2011. – V. 182. – P. 84-86.
15. Tung J.C. Systematic *ab initio* study of the magnetic and electronic properties of all 3d transition metal linear and zigzag nanowires [Текст] / J.C. Tung, and G.Y. Guo // Phys. Rev. B. – 2007. – V. 76. – P. 094413.
16. Ataca C. Structural, electronic, and magnetic properties of 3d transition metal monatomic chains: First-principles calculations [Текст] /C. Ataca, S. Cahangirov, E. Durgun, Y.-R. Jang, and S. Ciraci // Phys. Rev. B. – 2008. – V. 77. – P. 214413.
17. Zeleny M. *Ab initio* density functional calculations of ferromagnetism in low-dimensional nanostructures: From nanowires to nanorods [Текст] / M. Zeleny, M. Sob and J. Hafner // Phys. Rev. B. – 2009. – V. 79. – P. 134421.
18. Zeleny M. Noncollinear magnetism in manganese nanostructures [Текст] / M. Zeleny, M. Sob and J. Hafner // Phys. Rev. B. – 2009. – V. 80. – P. 144414
19. Hope B. Contrasting spin-polarization regimes in Co nanowires studies by density functional theory [Текст] / B. Hope, A. Horsfield // Phys. Rev. B. – 2008. – V. 77. – P. 094442.
20. Blaha P. Full-potential, linearized augmented plane wave programs for crystalline systems [Текст] / P. Blaha, K. Schwarz, P.I. Sorantin, and S.B. Trickey // Comp. Phys. Commun. – 1990. – V. 59. – P. 399 – 415.
21. Perdew J.P. Generalized Gradient Approximation Made Simple [Текст] / J.P. Perdew, S. Burke, and M. Ernzerhof // Phys. Rev. Lett. – 1996. – V. 77. – P. 3865–3868.

References

1. Svensson K., Olin H., Olsson E. Nanopipettes for metal transport. *Phys. Rev. Lett*, 2004, V. 93, P.145901.
2. Jin-Phillipp N. Y., Puhle M. Carbon nanotube/metal interface studies by cross-sectional transmission electron microscopy. *Phys. Rev. B*, 2004, V. 70, P. 245421.
3. Varner J. H., Rummeli M.H., Bachmatiak A., Büchner B. Structural transformations of carbon chains inside nanotubes. *Phys. Rev. B*, 2010, V. 81, P. 155419.
4. Guerret-Piécourt C., Le Bouar Y., A. Loiseau, H Pascard Relation between metal electronic structure and morphology of metal compounds inside carbon nanotubes, *Nature*, 1994, V. 372, P.761.
5. Grobert N., Hsu W.K., Zhu Y.Q., Hare J.P., Kroto H.W., Walton D.R.M., Terrones M., Terrones H., Pedish P., Ruhle M., Escudero R., Morales F. Enhanced magnetic coercivities in Fe nanowires. *Appl. Phys. Lett*, 1999, V. 75, P. 3363.
6. Karmakar S., Sharma S.M., Teredesai P.V., Sood A.K. Pressure- induced phase transition in iron – filled carbon nanotubes: X-ray diffraction studies. *Phys. Rev.B*, 2010, V. 69, P. 165414.
7. Weissmann M., Garsia G., Kiwi M., Ramirez R. Theoretical study of carbon – coated iron nanowires. *Phys. Rev. B*, 2004, V. 70, P. 201401(R).
8. Kang Y.J., Choi J., Moon C.Y., Chang K.J. Electronic and magnetic properties of single – wall carbon nanotubes filled with iron atoms. *Phys. Rev. B*, 2005, V. 71, P. 115441.
9. Mao Y.-L. X.-H. Yan and Y.Xiao First principles study of transition – metal – doped single – walled carbon nanotubes, *Nanotechnology*, 2005, V. 16, P. 3092–3096.
10. Weissmann M. G. Garsia, M. Kiwi, R. Ramirez, C.C. Eu Theoretical study of iron filled carbon nanotubes. *Phys. Rev. B*, 2006, V. 73, P. 125435.
11. Jang Y.-R., Lee J.I. Magnetism of linear Fe, Co, and Ni nanowires encapsulated in zigzag ($n,0$) carbon nanotubes (CNT) with $n = 5$ to 9: A first-principles study. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 2007, V. 244, P. 4407–4410.
12. Kang Y.J. Chang K.J. The electronic and magnetic properties of carbon nanotubes interacting with iron atoms. *Physica B*, 2006, V. 376-377, P. 311–315.
13. Mazzarello R., Tosatti E. Connection between magnetism and structure in Fe double chains on the Ir(100) surface. *Phys. Rev. B*, V. 79, P. 134402.
14. Tung J.C., Guo G. Y. An *ab initio* study of the magnetic and electronic properties of Fe, Co, and Ni nanowires on Cu(001) surface. *Computer Physics Communications*, 2011, V. 182, P. 84–86.
15. Tung J.C., Guo G.Y. Systematic *ab initio* study of the magnetic and electronic properties of all 3d transition metal linear and zigzag nanowires. *Phys. Rev. B*, 2007, V. 76, P. 094413.
16. Ataca C., Cahangirov S., Durgun E., Jang Y.-R., and Ciraci S. Structural, electronic, and magnetic properties of 3d transition metal monatomic chains: First-principles calculations. *Phys. Rev. B*, 2008, V. 77, P. 214413.
17. Zeleny M., Sob M. and Hafner J. *Ab initio* density functional calculations of ferromagnetism in low-dimensional nanostructures: From nanowires to nanorods. *Phys. Rev. B*, 2009, V. 79, P.134421.
18. Zeleny M., Sob M. and Hafner J. Noncollinear magnetism in manganese nanostructures. *Phys. Rev. B*, 2009, V. 80, P. 144414.
19. Hope B. Horsfield A. Contrasting spin-polarization regimes in Co nanowires studies by density functional theory. *Phys. Rev. B*, 2008, V. 77, P. 094442.
20. Blaha P., Schhwarz K., Sorantin P.I., and Trickey S.B. Full-potential, linearized augmented plane wave programs for crystalline systems. *Comp. Phys. Commun*, 1990, V. 59, P. 399–415.
21. Perdew J.P., Burke S., and Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple *Phys. Rev. Lett*, 1996, V. 77, P. 3865–3868.

RESUME

V. G. Boutko, A. A. Gusev

Modeling Growth of the Diameter in Iron Nanowire.

Structural and Electronic Properties

Nanowires along with nanotubes are the most famous representatives of the physics of the nanoworld. Of these, transition metal nanowires are of the greatest interest, since they are used in many areas of modern nanotechnology: spintronics, magnetic recording, highly sensitive magnetic sensors. The purpose of this work is to study the structural and electronic properties of iron nanowires of various diameters.

The methods of the density functional theory are used to calculate the electronic structure of iron nanowires with transverse dimensions up to 12.6Å. The calculations were carried out taking into account not only the transverse, but also the longitudinal optimization of the structural parameters of the nanowires.

Structural and electronic properties of iron nanowires with the number of atoms in the unit cell up to 37 are systematically investigated.

In the cross section, the structure of the iron nanowire with 37 atoms in the unit cell practically coincides with the structure of the bcc Fe. The lattice constant C also increases with increasing number of metal atoms in an elementary cell, but much slower than the values characterizing the transverse dimensions of the nanowire and still far from the crystalline one.

РЕЗЮМЕ

В. Г. Бутько, А. А. Гусев

Моделирование роста диаметра нанопровода железа.

Структурные и электронные свойства

Нанопровода наряду с нанотрубками являются наиболее известными представителями физики наномира. Из них наибольший интерес представляют нанопровода переходных металлов, поскольку они находят применение во многих областях современных нанотехнологий: спинтронике, магнитной записи, высокочувствительных магнитных сенсорах. Целью настоящей работы является изучение структурных и электронных свойств нанопроводов железа различного диаметра.

Методами теории функционала плотности выполнены расчеты электронной структуры нанопроводов железа с поперечными размерами до 12.6Å. Расчеты проведены с учетом не только поперечной, но и продольной оптимизации структурных параметров нанопроводов.

Систематически исследованы структурные и электронные свойства нанопроводов железа с количеством атомов в элементарной ячейке до 37.

В поперечном сечении структура нанопровода Fe_{37} практически совпадает со структурой ОЦК Fe. Постоянная решетки C увеличивается с ростом n , но значительно медленнее, чем величины, характеризующие поперечные размеры НП, и еще далека от кристаллической.

Статья поступила в редакцию 01.08.2019.