

Ni 原子链填充碳纳米管的能量、电子结构和磁性的第一性原理计算*

李姝丽¹⁾²⁾ 张建民^{1)†}

1) (陕西师范大学物理学与信息技术学院, 西安 710062)

2) (西安文理学院物理系, 西安 710065)

(2010年8月1日收到; 2010年9月29日收到修改稿)

在广义梯度近似(GGA)下,利用密度泛函理论(DFT)框架下的第一性原理投影缀加波(PAW)赝势方法,研究了单根 Ni 原子链填充扶手椅型(n, n) ($5 \leq n \leq 9$)单壁碳纳米管的能量、电子结构和磁性. 结果表明(5,5)碳纳米管直径过小排斥 Ni 原子链的插入,(6,6)碳纳米管是容纳 Ni 原子链的最小碳纳米管,特别是 Ni 原子链位于其中心轴线上时的形成能最低. 以 Ni@ (6,6)和 Ni@ (7,7)系统为例,计算并分析了其自旋极化能带结构,电子总态密度,分波态密度和磁性,发现 Ni 原子的 3d 态电子对费米能级处的总态密度起决定作用,直径较大的碳纳米管对内部 Ni 原子链的磁矩限制较弱.

关键词: Ni 原子链, 碳纳米管, 电子结构, 磁性能

PACS: 88.30.rh, 68.65.-k, 75.75.-c, 63.20.dk

1. 引言

由于碳纳米管拥有卓越的力学、光学、电学和磁学性能,引起了人们的广泛关注^[1-12]. 纳米晶体、能量储存、场发射显示器、化学和生物传感器、氢储存等技术方面都可能成为其应用领域^[13,14]. 为了防止铁磁性金属(如 Fe, Co, Ni)纳米线或链的氧化,实验上常将其填充到具有保护作用的碳纳米管内^[15-22]. 随着计算机的计算能力和运算速度的提高,用计算机模拟铁磁性金属填充碳纳米管成为可能,模拟结果不仅可以很好地解释已有的实验结果,还能为新实验提供理论指导.

本文采用密度泛函理论(density functional theory, DFT)框架下的第一性原理 Vienna ab-initio Simulation Package (VASP) 程序包^[23-26]研究了过渡金属 Ni 原子链填充扶手椅型(n, n) ($5 \leq n \leq 9$)单壁碳纳米管的能量、电子结构和磁性.

2. 计算模型和方法

在本文计算中,离子和电子的相互作用采用比超软赝势(ultrasoft pseudopotentials)精确的投影缀加波(projector augmented wave, PAW)赝势^[27]描述,它对很多材料都能提供非常精确的结构信息和能量信息. 取 Ni 和 C 原子的价电子结构分别为 $3d^8 4s^2$ 和 $2s^2 2p^2$. 电子交换与关联能采用广义梯度近似(generalized gradient approximation, GGA)下的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 模型处理^[28]. 选择力和能量的收敛标准分别为 0.02 eV/\AA 和 10^{-4} eV/atom . 电子波函数用平面波函数展开,平面波截断能取 400 eV ; 布里渊区 k 点网格取样采用以 Gamma 点为中心的 $1 \times 1 \times 13$ 的 Monkhorst-Pack 自动方法^[29]. 计算采用一维超胞近似,在碳纳米管与其周期镜像之间加以 13 \AA 厚的真空层以便消除碳纳米管与其周期镜像之间的相互作用. 因为原子间的相互作用范围远小于 13 \AA ,使碳纳米管与其上、下、左、

* 国家重点基础研究发展计划(973)(批准号:2004CB619302),国家自然科学基金(批准号:51071098)和西安文理学院中青年科研基金(批准号:kyc201008)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: jianm_zhang@yahoo.com

右的四个相邻碳纳米管(即周期镜像)相邻管壁间的距离为 13\AA ,便可以消除碳纳米管与其上、下、左、右的四个相邻碳纳米管(即周期镜像)间的相互作用并满足布洛赫(Bloch)定理的使用条件.

作为例子,图 1(a)和(b)分别为 Ni 原子链填充(6,6)碳纳米管的端面图和侧面图,其中灰色和黑色小球分别代表 Ni 原子和 C 原子. R 表示

碳纳米管半径, r 表示 Ni 原子链偏离纳米管中心轴线的距离. 为使 Ni 原子链与碳纳米管之间的周期匹配,我们取面心立方 Ni 的密排方向 $[110]$ 单根 Ni 原子链,并将其相邻原子间距 2.492\AA 减小到碳纳米管的周期长度 2.46\AA ,并使每个 Ni 原子始终在过管壁 C—C 键组成的六边形中心(洞位)的半径上.

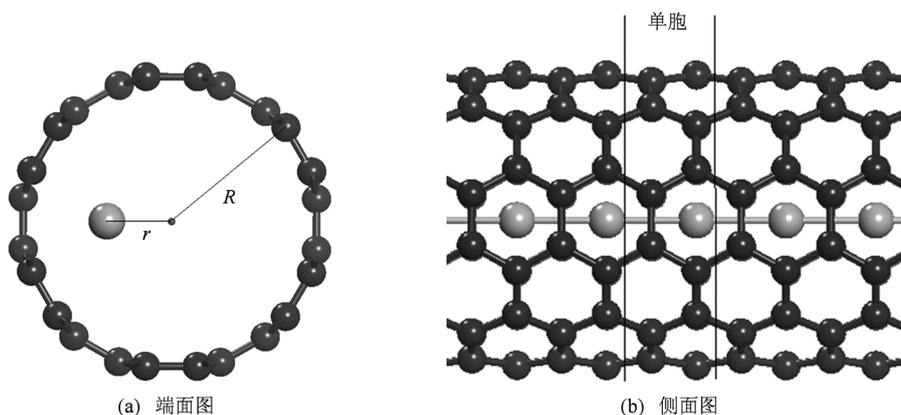


图 1 Ni 原子链填充(6,6)碳纳米管 (a)端面图; (b)侧面图

3. 结果和讨论

3.1. 形成能

为了研究 Ni 原子链填入碳纳米管的稳定性. 我们计算了 Ni 原子链偏离 (n,n) ($5 \leq n \leq 9$) 碳纳米管中心轴线不同距离 r 的形成能

$$\Delta E = E_{\text{Ni}@ (n,n)} - (E_{\text{Ni}} + E_{(n,n)}),$$

其中 $E_{\text{Ni}@ (n,n)}$, E_{Ni} 和 $E_{(n,n)}$ 分别表示 Ni@ (n,n) 组合系统, Ni 原子链和 (n,n) 碳纳米管的能量. 作为例子,有关 Ni@ $(5,5)$, Ni@ $(6,6)$ 和 Ni@ $(7,7)$ 组合系统的计算结果如图 2 所示. 垂直箭头所指位置表示三种碳纳米管的半径. 首先,由图 2 可见 Ni@ $(5,5)$ 系统的形成能 $\Delta E > 0$, 表明 $(5,5)$ 碳纳米管的直径 6.78\AA 过小,致使 $(5,5)$ 碳纳米管与 Ni 原子链间相互排斥,即 Ni 原子链填入 $(5,5)$ 碳纳米管的过程是完全吸热的. 而直径为 8.14\AA 的 $(6,6)$ 碳纳米管在 $r < 1.0\text{\AA}$, 以及直径为 9.49\AA 的 $(7,7)$ 碳纳米管在 $r < 1.5\text{\AA}$ 范围内均有系统形成能 $\Delta E < 0$, 表明在此范围内 $(6,6)$ 和 $(7,7)$ 碳纳米管与 Ni 原子链相互吸引, Ni 原子链可以自发地插入碳纳米管且是放热的. 此范围内系统的形成能 $\Delta E < 0$, 还说明

Ni 原子链可以在偏离 $(6,6)$ 和 $(7,7)$ 碳纳米管中心轴线一定范围内自由移动. 其次, Ni 原子链位于 $(6,6)$ 和 $(7,7)$ 碳纳米管中心轴线时,系统形成能分别为 -0.056 eV 和 -0.052 eV , 是各自系统形成能的最小值. 由能量最小化原理可知, Ni 原子链在碳纳米管中心轴线是相对稳定结构, 而填入 $(6,6)$ 碳纳米管中心轴线时更为稳定.

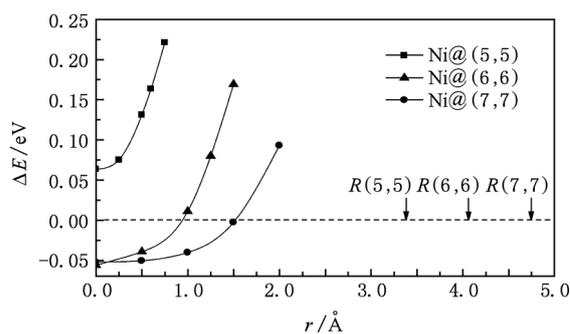


图 2 Ni 原子链位于 $(5,5)$, $(6,6)$ 和 $(7,7)$ 碳纳米管中不同 r 处的形成能 ΔE

为了全面了解填入碳纳米管中心轴线的 Ni 原子链与管间的相互作用. 我们又计算了 Ni 原子链位于不同直径的碳纳米管中心轴线 Ni@ (n,n) ($5 \leq n \leq 9$) 组合系统的形成能, 结果列在表 1 第 2 列中,

其与碳纳米管直径关系如图 3 所示. 首先, 由图 3 可见, Ni 原子链与碳纳米管的作用类似于两个大分子间的相互作用. $n = 5$ 时 $\Delta E > 0$, 即两者间表现为斥力, $n \geq 6$ 时 $\Delta E < 0$, 两者间表现为引力, 且当管直径增加时, Ni 原子链与 (n, n) ($n \geq 6$) 碳纳米管间引力随之减小, 组合系统的能量逐渐趋于两部分组合前的能量之和. 其次, Ni@ (6,6) 系统对应最小的形成能 -0.056 eV, Ni@ (7,7) 和 Ni@ (8,8) 的形成能分别比它大 0.004 eV 和 0.023 eV, 即比 Ni@ (6,6) 系统的形成能大 7% 和 42%, 这一结果充分表明 Ni 原子链填充 (6,6), (7,7) 扶手椅型单壁碳纳米管时, 与管的吸引力较大, 填充 (8,8) 碳纳米管时, 与管的吸引力明显减小. 由此推断, 很小的力就能将多根 Ni 原子链自发地拉入端帽张开的较大直径碳纳米管中. 这种现象我们在 Cu 纳米线填充碳纳米管中也曾看到^[30].

表 1 Ni 原子填入中心轴线时系统形成能 ΔE 、
纳米管直径 D 和系统磁矩 μ

系统	$\Delta E/\text{eV}$	$D/\text{\AA}$	μ/μ_B
Ni@ (5,5)	0.064	6.78	1.04
Ni@ (6,6)	-0.056	8.14	1.09
Ni@ (7,7)	-0.052	9.49	1.09
Ni@ (8,8)	-0.033	10.85	1.10
Ni@ (9,9)	-0.021	12.20	1.10

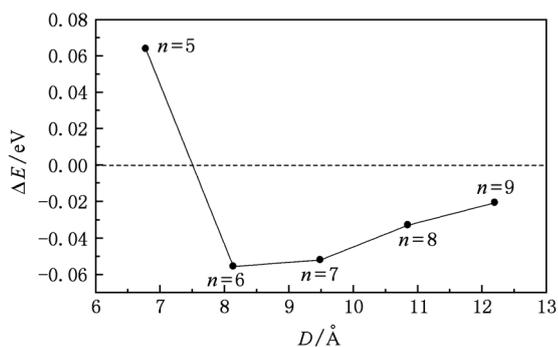


图 3 Ni@ (n,n) ($5 \leq n \leq 9$) 系统单胞形成能 ΔE 与碳纳米管直径 D 关系

3. 2. 电子结构

3. 2. 1. 电荷密度分布

图 4 给出了 Ni 原子链、 (n, n) 碳纳米管和 Ni@ (n, n) 系统 ($5 \leq n \leq 7$) 过 Ni 原子对应位置横截面上电荷密度分布等高线. 所有等高线轮廓图从

-0.00013 开始并以 0.0024 间隔相继变化到 0.15 . 通过分析电荷密度图, 我们能够进一步了解 Ni 原子链和碳纳米管的复杂相互作用. 图 4(e) Ni@ (5,5) 系统中 Ni 原子链和碳纳米管间存在一定电荷密度, 说明二者有相互作用, 根据形成能分析这是排斥作用. 图 4(f) Ni@ (6,6) 系统 Ni 原子链和碳纳米管间电荷密度明显减小, 表明两者间作用减弱. 这种系统组成部分间的弱相互作用在钾掺杂的单壁碳纳米管束中也被观察到^[31]. 在图 4(g) Ni@ (7,7) 系统中电荷密度已经趋于组成部分电荷密度叠加, 表明随着碳纳米管直径的增加, Ni 原子链和碳纳米管间的作用更弱. 此结论同 Ni@ (5,5), Ni@ (6,6) 和 Ni@ (7,7) 系统形成能绝对值依次为 0.064 eV, 0.056 eV 和 0.052 eV 的结果一致.

3. 2. 2. 能带和态密度

为了分析 Ni 原子链填充碳纳米管后系统的磁电性能, 解释电子能量分布, 以相对稳定的 Ni@ (6,6) 和 Ni@ (7,7) 系统为例, 根据自旋极化状态下参数设置, 详细计算并分析其自旋极化能带结构, 电子态密度 DOS 和分波态密度 PDOS 等性质.

图 5(a) 和 (b) 分别给出了 Ni@ (6,6) 和 Ni@ (7,7) 系统上自旋和下自旋的自旋极化能带结构图. 为了比较, 图 5(c), (d) 和 (e) 还分别给出了 Ni 原子链、(6,6) 和 (7,7) 碳纳米管的能带结构图. 图中能量为 0 处虚线表示费米能级 E_F . 首先, 图 5(d) 和 (e) 分别显示 (6,6) 和 (7,7) 碳纳米管在 Γ 到 Z 约 $3/5$ 处有能带穿过费米能级 E_F , 说明 (n, n) 碳纳米管具有金属性质. 填入 Ni 原子链的 Ni@ (6,6) 和 Ni@ (7,7) 系统亦有能带穿过费米能级 E_F (见图 5(a) 和 (b)), 表明组合系统仍保持金属性. 第二, 图 5(d) 和 (e) 还分别显示 (6,6) 和 (7,7) 碳纳米管上自旋和下自旋能带结构相同, 说明 (n, n) 碳纳米管无磁性. 而图 5(c) 的 Ni 原子链在费米能级 E_F 附近上自旋和下自旋能带不对称, 即下自旋穿过费米能级的能带比上自旋的多三条, 表明 Ni 原子链具有磁性, 将磁性金属 Ni 原子链插入 (6,6) 和 (7,7) 碳纳米管后的组合系统在费米能级 E_F 附近上自旋和下自旋的能带结构亦不对称 (见图 5(a) 和 (b)), 即组合系统同样具有磁性.

图 6(a), (b), (c), (d) 和 (e) 分别给出了 Ni 原子链、(6,6) 碳纳米管、(7,7) 碳纳米管、Ni@ (6,6) 系统和 Ni@ (7,7) 系统的上自旋与下自旋的自旋极化电子总态密度 (DOS). 首先, 从图 6(b) 和

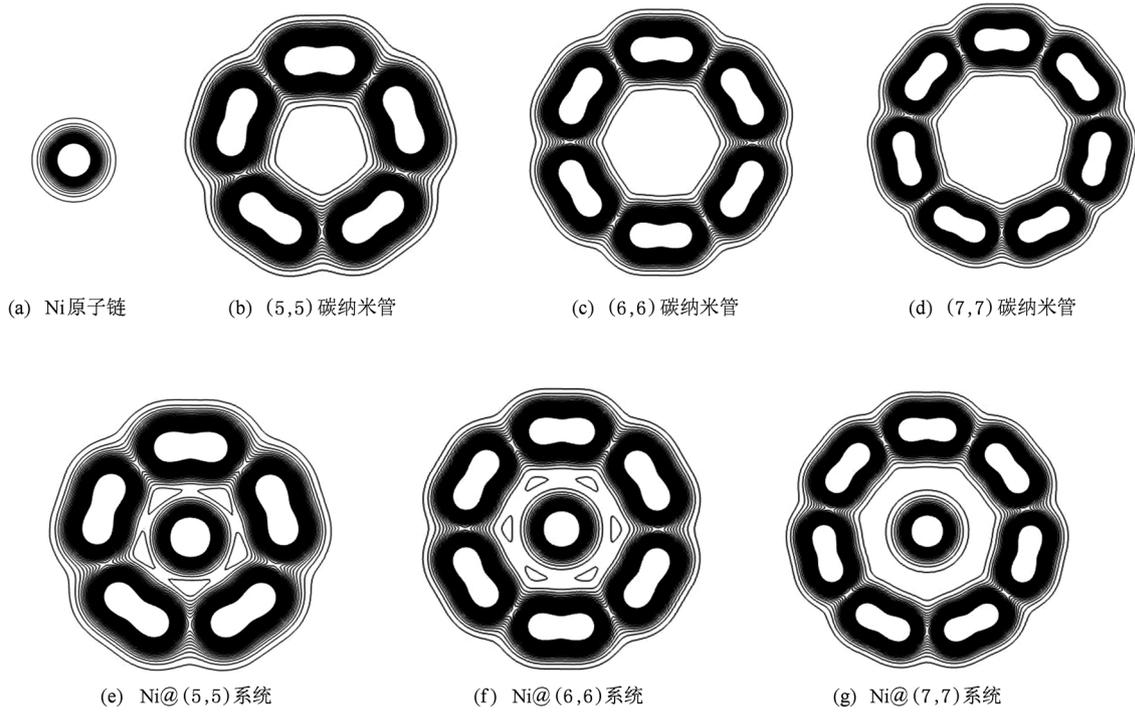


图4 Ni原子链、(n,n)碳纳米管和Ni@(n,n)系统过Ni原子对应位置横截面上电荷密度分布等高线

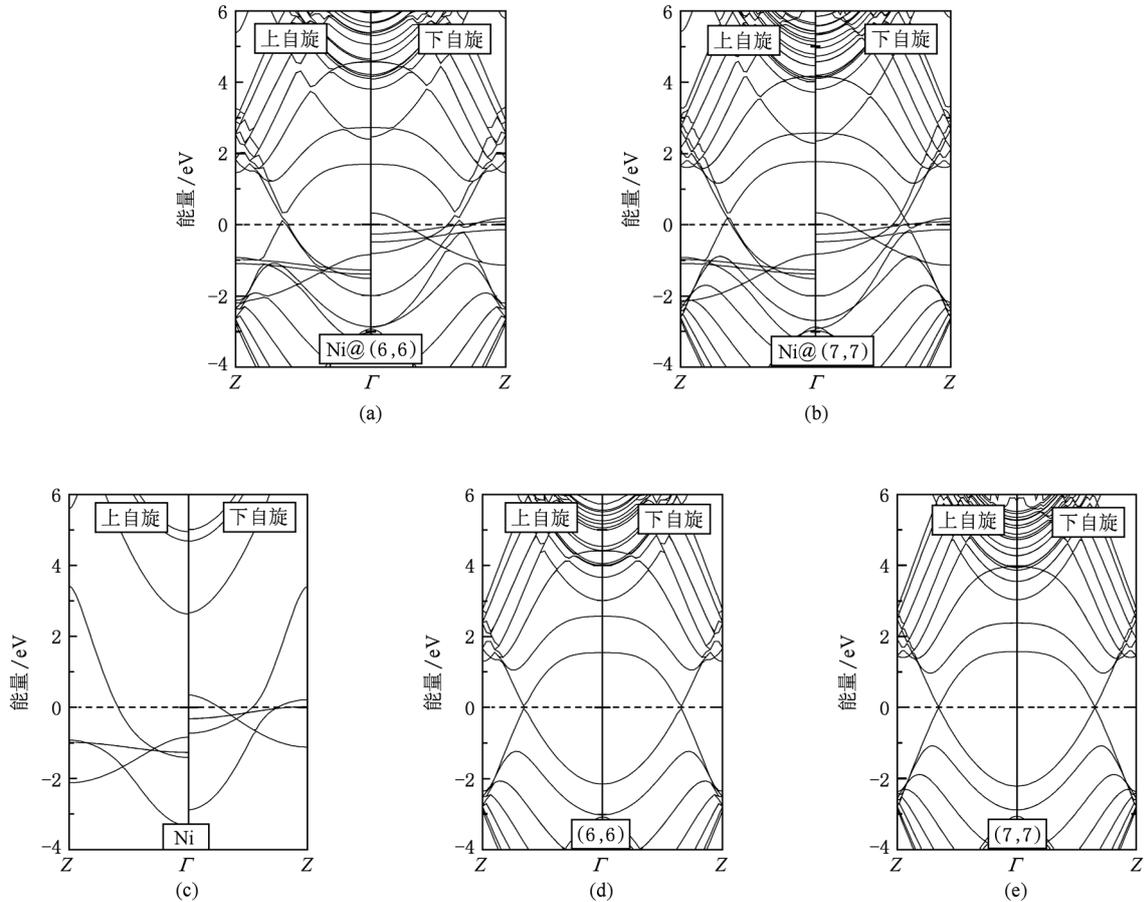


图5 能带结构图. 费米能级 E_F 设在零能量处 (a) Ni@(6,6)系统; (b) Ni@(7,7)系统; (c) Ni原子链; (d) (6,6)碳纳米管; (e) (7,7)碳纳米管

(c)可以看出,(6,6)和(7,7)碳纳米管在费米能级附近的电子总态密度不为零也表明了它们的金属性,完全对称的上自旋与下自旋的电子总态密度表明无磁性.金属 Ni 原子链的总态密度图 6(a)中费米能级 E_F 上的下自旋态密度远远大于上自旋态密度,即上、下自旋总态密度不对称与能带结构分析一致,这一结果表明其具有较高的自旋极化和磁性.其次,从图 6(d)和(e)的 Ni@ (6,6)和 Ni@ (7,7)系统电子总态密度在费米能级附近的非零电子总态密度的非对称性表明这些系统也具有磁性.第三,比较各图发现,Ni@ (6,6)和 Ni@ (7,7)系统上自旋中费米能级 E_F 以下的最高峰和费米能级 E_F 以上的前两个峰分别来自 Ni 原子链和碳纳米管的贡献,下自旋也有同样规律.从总态密度图我们还发现碳纳米管的束缚使上自旋费米能级 E_F 以下的最高峰的峰位略向低能区移动,即从 Ni 原子链的

-1.04 eV变为 Ni@ (6,6)和 Ni@ (7,7)系统的 -1.08 eV和 -1.06 eV.尤其是下自旋的最高峰由 Ni 原子链的 0eV 变为 Ni@ (6,6)和 Ni@ (7,7)系统的 -0.15 eV 和 -0.11 eV.相反,Ni 原子链对碳纳米管的影响使得费米能级 E_F 以上的前两个峰的峰位略向高能区移动,即从(6,6)碳纳米管的 1.47 eV 和 2.56 eV 分别变为 Ni@ (6,6)系统的 1.70 eV 和 2.75 eV,从(7,7)碳纳米管的 1.49 eV 和 2.35 eV 分别变为 Ni@ (7,7)系统的 1.74 eV 和 2.60 eV.第四,从图 6(d)和(e)发现 Ni@ (6,6)和 Ni@ (7,7)系统下自旋中费米能级处的态密度由 Ni 原子链的 -6.23states/eV 分别变为 -5.24states/eV 和 -5.04states/eV(此处负号仅表示下自旋).由于一个体系的电子导电性或超导性主要取决于费米能级上的态密度 $D(E_F)$,所以从较高的电子导电性角度看,Ni@ (6,6)系统优于 Ni@ (7,7)系统.

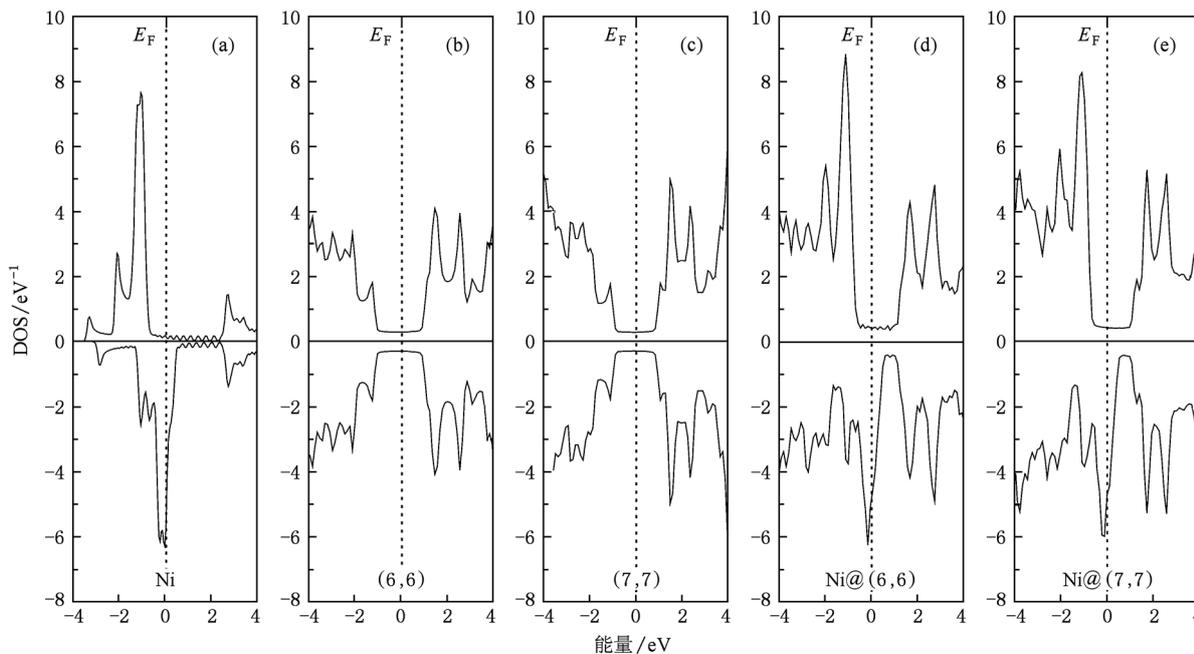


图 6 总态密度(DOS).费米能级 E_F 由零能量处垂直虚线表示(正 DOS 表示上自旋;负 DOS 表示下自旋) (a) Ni 原子链;(b) (6,6)碳纳米管;(c) (7,7)碳纳米管;(d) Ni@ (6,6)系统;(e) Ni@ (7,7)系统

为了分析 Ni 原子各轨道电子对总态密度的贡献,图 7 给出了 Ni@ (6,6)和 Ni@ (7,7)系统的自旋极化总态密度(用总态密度表示)、系统中 Ni 原子链的分波态密度 PDOS(用 Ni 总态密度表示)、以及 Ni 原子的 s, p, d 轨道电子的分波态密度 PDOS(分别用 Ni s, Ni p, Ni d 表示).首先,由图 7(a)和(b)可知两种组合系统费米能级 E_F 附近的能量状态主要来源于 Ni 原子链,而由图 7(c)和(d)可知

Ni 原子链的态密度主要由 Ni 原子的 d 轨道电子形成,s 和 p 轨道电子的贡献非常小.由此我们判断系统费米能级 E_F 附近的电子总态密度主要由 Ni 原子的 3d 轨道电子贡献.其次,由四个图在费米能级 E_F 处的下自旋态密度远大于上自旋态密度可知,处于费米能级上的这些 3d 轨道电子大多数自旋向下.因此,Ni 原子链填充(6,6)和(7,7)碳纳米管后具有与 Ni 原子链类似的电子和磁特性(见图 6(a)).

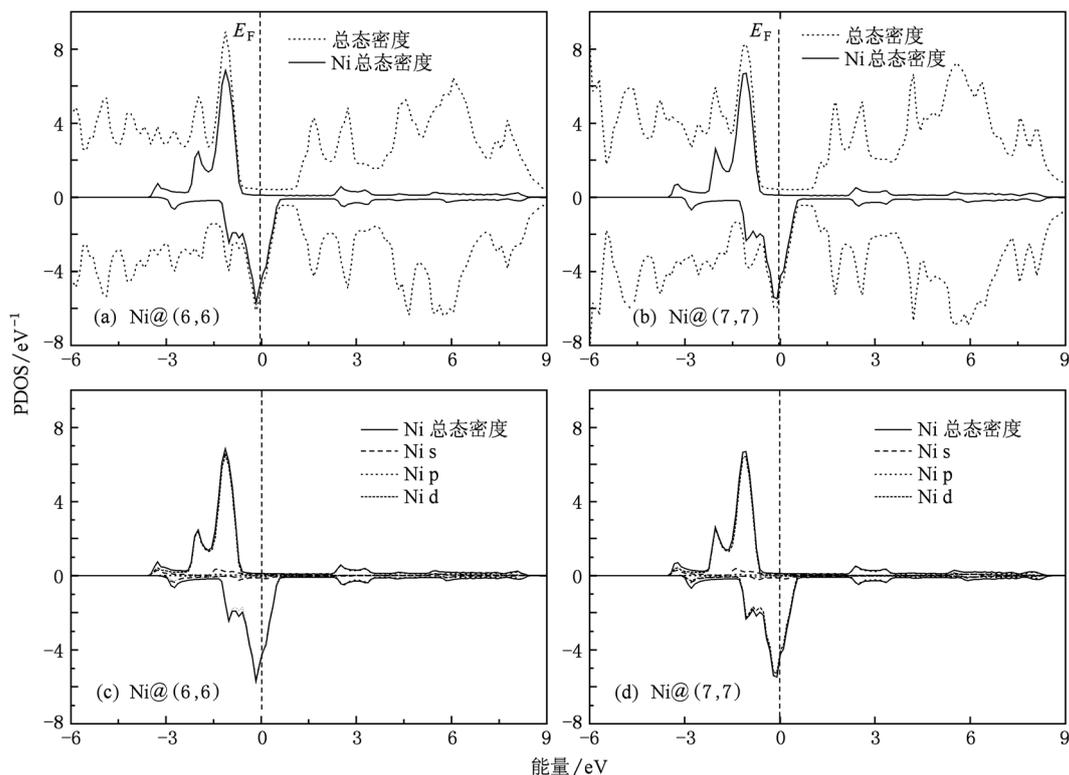


图7 系统电子分波态密度 PDOS, 投影在 Ni 原子及其 s, p, d 轨道的电子分波态密度 PDOS. 费米能级 E_F 由零能量处垂直虚线表示(正 PDOS 表示上自旋; 负 PDOS 表示下自旋) (a) Ni@(6,6) 系统; (b) Ni@(7,7) 系统; (c) Ni@(6,6) 系统中 Ni 原子的 s, p, d 轨道; (d) Ni@(7,7) 系统中 Ni 原子的 s, p, d 轨道

3.3. 磁性

Ni 原子链填于扶手椅型 (n, n) ($5 \leq n \leq 9$) 碳纳米管中心轴线的磁矩计算结果列于表 1 第 4 列中. 可以看出, 除了 Ni@(5,5) 系统磁矩 $1.04 \mu_B$ 小于 Ni 原子链的磁矩 $1.10 \mu_B$ 外, 其余系统的磁矩接近 Ni 原子链的磁矩. 这表明, 随着碳纳米管直径的增加, 碳纳米管对 Ni 原子链磁矩的影响降低. 虽然 Ni@(6,6) 和 Ni@(7,7) 系统磁矩相同, 但考虑到纳米结构小尺寸的要求, (6,6) 碳纳米管应该是 Ni 原子链填充扶手椅型碳纳米管的最佳选择.

4. 结论

基于密度泛函理论(DFT), 采用广义梯度近似(GGA)的第一性原理投影缀加波(PAW)的 VASP 程序包比较研究了 Ni 原子单链填充扶手椅型 (n, n) ($5 \leq n \leq 9$) 单壁碳纳米管的形成能、电子结构和磁性, 得出以下结论:

1. 形成能结果表明, Ni 原子链填充直径小的 (5,5) 碳纳米管过程吸热, 填充直径大 (n, n) ($n \geq 6$) 碳纳米管放热. Ni 原子链位于碳纳米管中心轴线是各种体系相对稳定的状态.

2. Ni@(6,6) 和 Ni@(7,7) 系统电子自旋极化能带结构中, 下自旋穿过费米能级的能带多于上自旋的这种不对称性结果表明 Ni 原子链填充 (n, n) 碳纳米管的复合系统同样具有磁性.

3. Ni@(6,6), Ni@(7,7) 系统和 Ni 原子链的总态密度 DOS、分波态密度 PDOS 的比较研究表明, 系统费米能级附近的能量状态主要来源于 Ni 原子的 3d 轨道电子, 并且 Ni 原子链填充 (6,6), (7,7) 碳纳米管后具有与 Ni 原子链类似的电子和磁特性.

4. 比较 Ni 原子链填充扶手椅型 (n, n) ($5 \leq n \leq 9$) 碳纳米管的磁矩结果, 可以得出管径较宽的碳纳米管对内部 Ni 原子链的限制较弱.

总之, 以上结论意味着 Ni@(n, n) ($6 \leq n \leq 9$) 碳纳米管系统能够应用于需求特定电子自旋态的运输电路中, 且以 Ni@(6,6) 系统为最佳选择.

- [1] Iijima S 1991 *Nature* **354** 56
- [2] Falvo M R, Clary G J, Taylor R M, Chi V, Brooks F P, Jr Washburn S, Superfine R 1997 *Nature* **389** 582
- [3] Liu H X, Zhang H M, Hu H Y, Song J X 2009 *Chin. Phys. B* **18** 734
- [4] Ni M Y, Wang X L, Zeng Z 2009 *Chin. Phys. B* **18** 357
- [5] Long Y Z, Li M M, Sui W M, Kong Q S, Zhang L 2009 *Chin. Phys. B* **18** 1221
- [6] Wang Y, Wu Q, He X J, Zhang S Q, Zhuang L L 2009 *Chin. Phys. B* **18** 1801
- [7] Wang Y J, Wang L D, Yang M, Liu G Q, Yan C 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4950 (in Chinese) [王益军、王六定、杨敏、刘光清、严诚 2010 物理学报 **59** 4950]
- [8] Xu H, Xiao J, Ouyang F P 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4186 (in Chinese) [徐慧、肖金、欧阳方平 2010 物理学报 **59** 4186]
- [9] Zhang Y, Wen B, Song X Y, Li T J 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 3583 (in Chinese) [张宇、温斌、宋肖阳、李廷举 2010 物理学报 **59** 3583]
- [10] Wang W, Zhang K W, Meng L J, Li Z Q, Zuo X Y, Zhong J X 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2672 (in Chinese) [王伟、张凯旺、孟利军、李中秋、左学云、钟建新 2010 物理学报 **59** 2672]
- [11] Yang T Z, Luo S Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 447 (in Chinese) [杨通在、罗顺忠 2010 物理学报 **59** 447]
- [12] Zhang L J, Hu H F, Wang Z Y, Wei Y, Jia J F 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 527 (in Chinese) [张丽娟、胡慧芳、王志勇、魏燕、贾金凤 2010 物理学报 **59** 527]
- [13] Saito R, Dresselhaus G, Dresselhaus M S 1998 *Physical Properties of Carbon Nanotubes* (London: ImperialCollege Press)
- [14] Dresselhaus M S, Dresselhaus G, Eklum P C 1996 *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes* (New York: Academic Press)
- [15] Bachtold A, Strunk C, Salvetat J P, Bonard J M, Forró L, Nussbaumer T, Schönemberger C 1999 *Nature* **397** 673
- [16] Kang Y J, Choi J, Moon C Y, Chang K J 2005 *Phys. Rev. B* **71** 115441
- [17] Grobert N, Hsu W K, Zhu Y Q, Hare J P, Kroto H W, Walton D R M, Terrones M, Terrones H, Redlich P H, Rühle M, Escudero R, Morales F 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 3363
- [18] Tsang S C, Chen Y K, Harris P J F, Green M L H 1994 *Nature* **372** 159
- [19] Guerret-Piécourt C, Le Bouar Y, Lolsseau A, Pascard H 2002 *Nature* **372** 761
- [20] Rao C N R, Sen R, Satishkumar B C, Govindaraj A 1998 *Chem. Commun.* **15** 1525
- [21] Satishkumar B C, Govindaraj A, Vanitha PV, Raychaudhuri A K, Rao C N R 2002 *Chem. Phys. Lett.* **362** 301
- [22] Che R C, Peng L M, Duan X F, Chen O, Liang X L 2004 *Adv. Mater.* **16** 401
- [23] Kresse G, Hafner J 1993 *Phys. Rev. B* **47** 558
- [24] Kresse G, Hafner J 1994 *Phys. Rev. B* **49** 14251
- [25] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Comput. Mater. Sci.* **6** 15
- [26] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [27] Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
- [28] Perdew J, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [29] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [30] Zhang J M, Du X J, Wang S F, Xu K W 2009 *Chin. Phys. B* **18** 5468
- [31] Jo C, Kim C, Lee Y H 2002 *Phys. Rev. B* **65** 035420

Energies, electronic structures and magnetic properties of Ni atomic chain encapsulated in carbon nanotubes: a first-principles calculation*

Li Shu-Li¹⁾²⁾ Zhang Jian-Min^{1)†}

1) (College of Physics and Information Technology, Shaanxi Normal University, Xi'an 710062, China)

2) (Department of Physics, Xian University of Arts and Science, Xi'an 710065, China)

(Received 1 August 2010; revised manuscript received 29 September 2010)

Abstract

In the generalized gradient approximation (GGA), energies, electronic structures and magnetic properties have been investigated for a single Ni atomic chain encapsulated in an armchair single-wall (n, n) carbon nanotubes ($5 \leq n \leq 9$) by using the first-principles projector augmented wave (PAW) potential within the density function theory (DFT) framework. The results show that the (5,5) tube is too narrow to wrap a Ni atomic chain, but the (6,6) tube is the smallest one to wrap a Ni atomic chain, especially at its central axis due to the lowest formation energy. The analyses of the spin-polarized band structures, total density of states (DOS), partial density of states (PDOS) and the magnetic moment of Ni@ (6,6) and Ni@ (7,7) systems show that the 3d states of Ni atom play determinant roles in DOS at the Fermi level, and the broader carbon nanotubes restrict slightly the magnetic moment of Ni atomic chain compared with the narrower ones.

Keywords: Ni atomic chain, carbon nanotube, electronic structures, magnetic properties

PACS: 88.30.rh, 68.65.-k, 75.75.-c, 63.20.dk

* Project supported by the State Key Development for Basic Research of China (Grant No. 2004CB619302), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51071098), and the Special Foundation for Outstanding Young Teachers of Xi'an University of Arts and Science (Grant No. kyc201008).

† Corresponding author. E-mail: jianm_zhang@yahoo.com