ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 4, № 3 (2003) С. 498-504

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 4, № 3(2003) P. 498-504

PACS 71.23.-K

ISSN 1729-4428

В.А. Андрющенко, В.Н. Антонов, Л.В. Бекеньов

Архітектура й електронна структура *K*-фази

Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України,
бул. Акад. Вернадського, 36, ГСП, Київ-142, 03680, Україна

Змодельовано атомно-кристалічну структуру антиперовскіту $Fe_{4-y}Al_yC_x$ нестехіометричного складу з урахуванням можливості заміни атомів вуглецю в октаедричних порах на вакансії, а також заміщення атомів алюмінію, які знаходяться у вершинах паралелепіпеду, атомами заліза. Проведено розрахунки електронної будови і проаналізовано магнітні властивості модельних антиперовскітів, які близькі за структурою до реальних антиперовскітних кристалів.

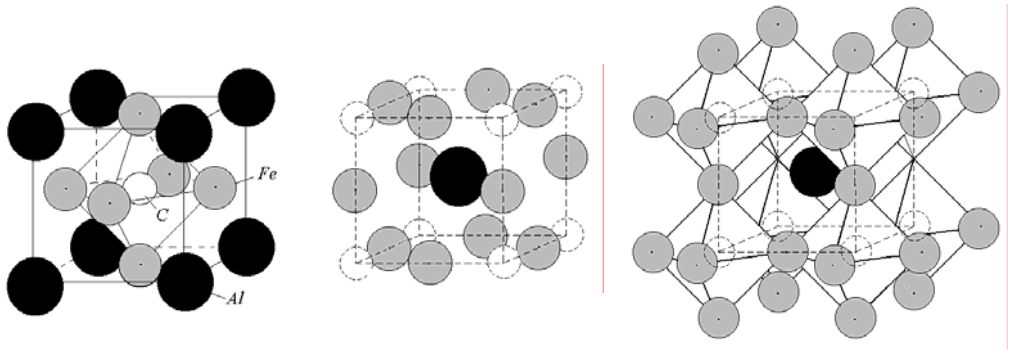
Ключові слова: кристалічна структура, антиперовскіт, магнітні властивості.

Стаття поступила до редакції 27.04.2003; прийнята до друку 27.09.2003.

I. Вступ

Більшість других фаз, що у гетерогенних системах формують макрограти, є фазами заміщення. Прикладом фаз, що одночасно є і фазами втілення, можуть служити карбідні фази типу $M_3M'C$, де M – перехідний метал, M' – неперехідний метал [1]. До найбільш досліджених з них можна віднести фази на основі перехідних металів Mn і Fe, наприклад Mn_3ZnC [1-5] і Fe_3AlC [1,6-13]. Остання займає значну область гомогенності в системі Fe-Al-C і може бути зафіксована в широкому температурному і концентраційному інтервалах [1,6-11]. Автори раніше опублікованих робіт, називаючи фазу Fe_3AlC K-фазою, ε-фазою, γ′- фазою чи подвійним карбідом [6-14], відзначали, що вона має упорядковану ГЦК кристалічну структуру типу перовскиту ($CaTiO_3$).

При вивченні цієї та інших фаз типу $M_3M'C$ виникало питання про те, як їх структура пов'язана з більш вивченою структурою перовскитоподібних окислів $MM'O_3$ [1]. Як указується в [1], структура сполуки $M_3M'C$ протилежна структурі $MM'O_3$ і її різновидам у тому відношенні, що атоми перехідного металу в ній розташовані у вершинах октаедрів, а не в його центрі. Так у випадку повної стехіометрії атоми вуглецю (неметалу) в Fe_3AlC знаходяться в центрах октаедрів, утворених шістьма атомами заліза, і атоми заліза мають у своєму найближчому оточенні два атоми вуглецю (рис. 1) на відміну від перовскитоподібних окислів, у яких атом перехідного металу оточений шістьма атомами кисню. Така протилежність атомних оточень обумовила нову назву для сполук типу $M_3M'C$ – антиперовскитні сполуки [15,16]. Антиперовскити мають магнітні, структурні та інші властивості перовскитних окислів. В них, як і в окислах, існують анізотропні спотворення, і цілком ймовірно існування змішаних оксикарбідів. Така подібність



а *б* *в*

Рис. 1. Елементарна комірка *K*-фази (Fe_3AlC): *а* – в центрі координат розміщується атом алюминію, *б* и *в* – в центрі координат розміщується атом вуглецю.

Таблиця 1.

Атомні та масові концентрації сполук.

Сполуки	Атомні концентрації, %			Масові концентрації, %		
	Fe	Al	C	Fe	Al	C
Fe_3Al	75	25	–	86,16	13,84	–
Fe_3AlC	60	20	20	81,16	13,04	5,8
Fe_4C	80	–	20	94,92	–	5,08
Fe_7Al	87,5	12,5	–	93,56	6,44	–
Fe_7AlC_2	70	10	20	88,49	6,09	5,42
$Fe_{14}Al_2$	87,5	12,5	–	93,56	6,44	–
$Fe_{14}Al_2C_4$	70	10	20	88,49	6,09	5,42
$Fe_{25}Al_7C_4$	69,45	19,45	11,1	85,52	11,55	2,93
$Fe_{28}Al_4C_4$	77,8	11,1	11,1	90,95	6,27	2,78

антиперовскитів та перовскитів дає змогу при конструюванні ймовірних антиперовскитних кристалічних структур використовувати погляди на архітектуру перовскитоподібних кристалів. У роботах [17,18] К.С. Александров і Б.В. Безносіков розглянули стехіометричні, катіон- і аніондефіцитні структури відомих перовскитоподібних кристалів як системи проростання пакетів, що складаються з n шарів ($n = 1 \div \infty$) зв'язаних вершинами октаедрів чи з комбінацій шарів октаедрів, пірамід і плоских квадратних сіток із проміжними блоками різних типів, і показали, що можливо робити прогнози нових типів таких структур, у тому числі й структур ймовірних надпровідників.

Розрахунки електронної структури сполук $M_3M'C$, де M = Mn, Fe і M′ = Zn, Al, Ga, Sn, були раніше проведені методом багаторазово розсіяних хвиль (X_a-PX) [19,20], а також лінійним методом МТ-орбіталей (ЛМТО) з урахуванням і без урахування спінової поляризації [15,16,21,22]. Більшість з розрахунків була проведена для стехіометричного составу цих сполук, у той час як експериментально стехіометрія за вуглецем в них не фіксується: Fe_3AlC_x, Fe_3GaC_x, Mn_3SnC_x, де $x \neq 1$ [1,6,10,14]. Більш того, як встановлено рентгенографічним, магнітометричним та мессбауерівським методами, при зміні концентрації алюмінію і вуглецю в упорядкованій фазі Fe_3AlC_x (К-фазі) змінюється параметр елементарної комірки її кристалічної ґратки і ступінь далекого атомного і магнітного порядків [23,24], а тому формулу цієї фази взагалі правильно записувати у вигляді $Fe_{4-y}Al_yC_x$ [23] і при розрахунках її електронної структури необхідно враховувати, що при дефіциті алюмінію його місця у вершинах куба займають атоми заліза. Задачею нашої роботи було проведення розрахунків електронної структури антиперовскиту Fe_3AlC з модельними атомно-кристалічними структурами, подібними до тих, що розглядаються в [17,18], з урахуванням тільки що відзначених особливостей, а також дослідження його магнітних властивостей.

II. Модельні атомні структури і методика розрахунків

Різні модельні структури К-фази ($Fe_{4-y}Al_yC_x$) зі збереженням максимально можливого атомного порядку утворювали, беручи за основу кристалічну структуру, зображену на рис. 1. Шляхом замін атомів вуглецю в октаедричних порах на вакансії, а також шляхом заміщення атомів алюмінію, що знаходяться у вершинах паралелепіпеда, атомами заліза зі збереженням при цих замінах упорядкованої симетрії чи антисиметрії, отримали різні сполуки типу $Fe_{4-y}Al_yC_x$ з різними хімічним складом (таблиця 1) та атомною структурою (рис. 2). У протилежність архітектурним побудовам перовскитоподібних кристалів в [17,18], октаедричний каркас (рис. 1в), що складається з атомів заліза, нами не змінювався. Він є, так би мовити, особливістю кристалічної будівлі антиперовскитів.

Самоузгоджені спін-поляризовані розрахунки електронної структури $Fe_{4-y}Al_yC_x$ проводили скалярно-релятивістським лінійним методом МТ-орбіталей (ЛМТО) у наближенні атомної сфери з урахуванням комбінованих поправок [25,26]. Для обмінно-кореляційного потенціалу використовували наближення локальної спінової щільності із інтерполяційною формулою Барта-Хедіна (Barth-Hedin) [27]. Вхідну щільність заряду для кожної наступної ітерації будували з урахуванням результатів декількох попередніх ітерацій за схемою Бройдена. Інтегрування в **k**-просторі здійснювалось поліпшеним методом тетраедрів [28]; при цьому вектори трансляцій $\mathbf{G}_1$, $\mathbf{G}_2$, $\mathbf{G}_3$ оберненої гратки розбивались відповідно на 16,16,12 частин для тетрагональних і на 20,20,20 частин для кубічних елементарних комірок. Розкладання проводили по базису, до якого включалися МТ-орбіталі з $l \leq 2$ для Fe та Al і з $l \leq 1$ для C. При проведенні обчислень обирали радіуси атомних сфер, наведені у таблиці 2.

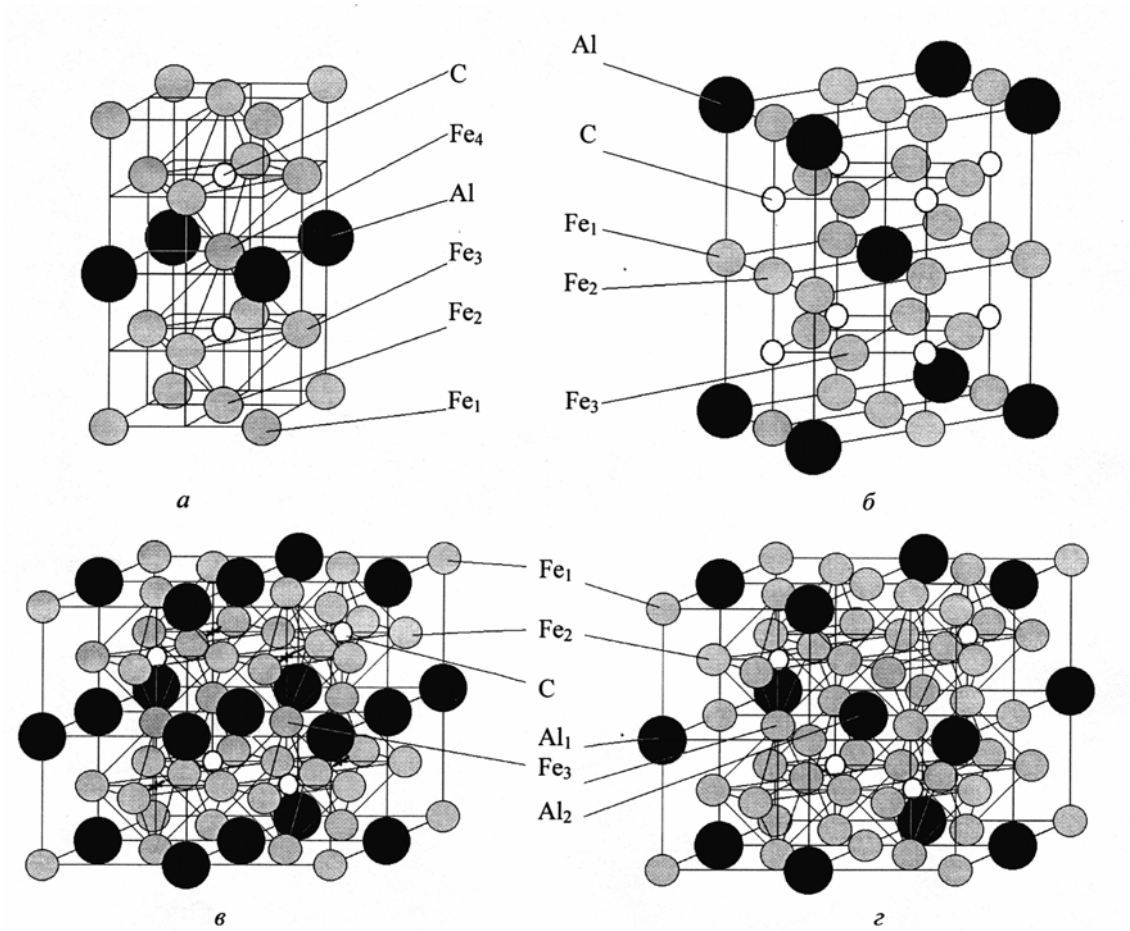


Рис. 2. Елементарні комірки Fe_7AlC_2 (*а*), $Fe_{14}Al_2C_4$ (*б*), $Fe_{25}Al_7C_4$ (*в*), $Fe_{28}Al_4C_4$ (*г*).

Розрахунки повних і парціальних щільностей електронних станів з урахуванням спінової поляризації, а також розрахунки повних магнітних моментів і магнітних моментів на атомах виконали для всіх модельних антиперовскитних сполук відмінних від стехіометричного складу, які наведені в таблиці 2. Параметр елементарної комірки обирали таким чином, щоб довжина просторової діагоналі октаедричного каркасу була близька до експериментального значення і дорівнювала a = 0,375 нм; співвідношення c/a для Fe_7AlC_x та $Fe_{14}Al_2C_x$ дорівнює c/a = 2. Для з'ясування впливу вуглецю та алюмінію на залізо були проведені додаткові розрахунки електронної структури заліза з простою кубічною структурою (Fe_4), а також Fe_4C і Fe_3AlC з вищенаведеним параметром елементарної комірки.

III. Результати розрахунків та їх обговорення

Частина результатів, виконаних у роботі розрахунків, представлена на рис. 3 і 4, а також у таблицях 2-4. На рис. 3 представлені щільності станів валентних електронів для сполук, які близькі за хімічним складом до досліджених раніше експериментально часток К-фази [10,24,29]. Видно,

Таблиця 2.

Радіуси атомних сфер у відносних одиницях та повні магнітні моменти сполук.

Сполука	R_{Fe}	R_{Al}	R_C	μ_{total}, μ_B /cell
Fe_4	2,753	–	–	10,356
Fe_3Al	2,696	2,742	–	6,959
Fe_3AlC	2,179	3,607	1,912	0,147
Fe_4C	3,678; 2,178	–	1,913	7,435
Fe_7Al	2,719; 2,696	2,742	–	12,416
Fe_7AlC_2	2,445; 2,35	2,458	2,061	4,242
$Fe_{14}Al_2$	2,82; 2,772	2,82	–	39,407
$Fe_{14}Al_2C_4$	2,853; 2,805	2,853	1,863	28,298
$Fe_{25}Al_7C_4$	2,463; 2,351	2,463	2,063	43,928
$Fe_{28}Al_4C_4$	3,608; 2,178	3,608	1,913	59,01

Таблиця 3.

Енергії Фермі E_F, повні щільності станів на рівні Фермі $N(E_F)$ та концентрації валентних електронів, розраховані на елементарну комірку.

Сполуки	E_F, eV	$N(E_F)$, 1/eV	Концентрація валентних електронів
Fe_4	7,958	5,063	32
Fe_3Al	8,508	1,526	27
Fe_3AlC	14,789	6,843	31
Fe_4C	14,549	6,754	36
Fe_7Al	8,054	13,082	59
Fe_7AlC_2	11,929	10,243	67
$Fe_{14}Al_2$	5,953	14,08	118
$Fe_{14}Al_2C_4$	8,709	21,131	134
$Fe_{25}Al_7C_4$	12,018	32,391	237
$Fe_{28}Al_4C_4$	13,652	31,798	252

Таблиця 4.

Магнітні моменти на атомах.

Fe_7AlC_2:						
$\mu(Fe_1)$, μ_B /atom	$\mu(Fe_2)$, μ_B /atom	$\mu(Fe_3)$, μ_B /atom	$\mu(Fe_4)$, μ_B /atom	$\mu(Al)$, μ_B /atom	$\mu(C)$, μ_B /atom	
2,81	0,82	0,22	– 0,23	– 0,01	0,00	
$Fe_{14}Al_2C_4$:						
$\mu(Fe_1)$, μ_B /atom	$\mu(Fe_2)$, μ_B /atom	$\mu(Fe_3)$, μ_B /atom	$\mu(Al_1)$, μ_B /atom	$\mu(C)$, μ_B /atom		
2,99	2,77	1,54	– 0,18	– 0,17		
$Fe_{25}Al_7C_4$:						
$\mu(Fe_1)$, μ_B /atom	$\mu(Fe_2)$, μ_B /atom	$\mu(Fe_3)$, μ_B /atom	$\mu(Al_1)$, μ_B /atom	$\mu(Al_2)$, μ_B /atom	$\mu(C)$, μ_B /atom	
2,86	1,82	1,74	– 0,11	– 0,1	– 0,16	
$Fe_{28}Al_4C_4$:						
$\mu(Fe_1)$, μ_B /atom	$\mu(Fe_2)$, μ_B /atom	$\mu(Fe_3)$, μ_B /atom	$\mu(Fe_4)$, μ_B /atom	$\mu(Al_1)$, μ_B /atom	$\mu(Al_2)$, μ_B /atom	$\mu(C)$, μ_B /atom
2,97	2,08	2,03	2,67	– 0,14	– 0,13	– 0,16
$Fe_{14}Al_2$:						
$\mu(Fe_1)$, μ_B /atom	$\mu(Fe_2)$, μ_B /atom	$\mu(Fe_3)$, μ_B /atom	$\mu(Al_1)$, μ_B /atom			
2,97	2,76	2,92	– 0,15			
Fe_7Al:					**Fe_4:**	
$\mu(Fe_1)$, μ_B /atom	$\mu(Fe_2)$, μ_B /atom	$\mu(Fe_3)$, μ_B /atom	$\mu(Fe_4)$, μ_B /atom	$\mu(Al)$, μ_B /atom	$\mu(Fe_1)$, μ_B /atom	$\mu(Fe_2)$, μ_B /atom
0,59	0,57	2,27	2,39	– 0,15	2,53	2,61
Fe_3Al:		**Fe_3AlC:**			**Fe_4C:**	
$\mu(Fe)$, μ_B /atom	$\mu(Al)$, μ_B /atom	$\mu(Fe)$, μ_B /atom	$\mu(Al)$, μ_B /atom	$\mu(C)$, μ_B /atom	$\mu(Fe_1)$, μ_B /atom	$\mu(Fe_2)$, μ_B /atom	$\mu(C)$, μ_B /atom
2,38	– 0,15	0,05	0,00	0,00	2,77	1,59	– 0,11

що щільності станів з направленням спинів угору і униз для цих сполук, які відрізняються симетрією і атомним порядком, мають різне розщеплення, розташування щодо енергії Фермі і магнітні моменти**.** Ще помітніше розходження локальних магнітних моментів на атомах, особливо на атомах заліза різного сорту (див. також табл. 4). Нижній частині енергетичного спектру відповідають гібридизовані C 2p–Fe 3d орбіталі з незначними домішками Al 3p-функцій, а у формуванні станів, розташованих ближче до енергії Фермі, беруть участь Al 3p та Fe 3d орбіталі. Гібридизація між 2p станами вуглецю та 3d станами заліза не така сильна, як між 3p станами алюмінію та 3d станами заліза, але завдяки їй 3d зона заліза значно розширюється, що дає змогу говорити

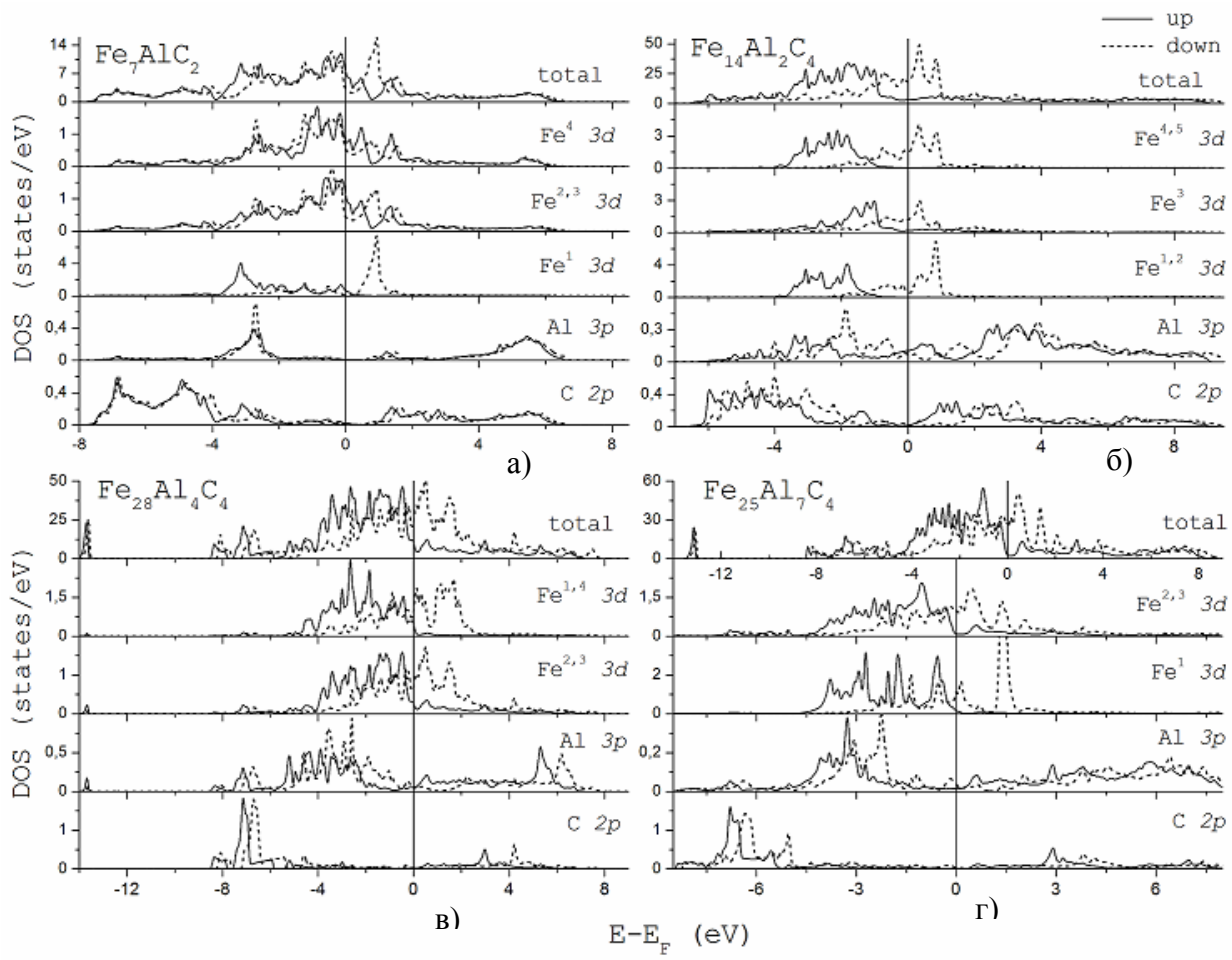


Рис. 3. Повні та парціальні щільності електронних станів:
а – Fe_7AlC_2; *б* – $Fe_{14}Al_2C_4$; *в* – $Fe_{28}Al_4C_4$; *г* – $Fe_{25}Al_7C_4$.

про наявність делокалізованої електронної підсистеми. Сполукам $Fe_{25}Al_7C_4$ і $Fe_{28}Al_4C_4$, близьким до сполук досліджених часток К-фази [24,29], відповідають найбільші величини повних щільностей станів на рівні Фермі (рис. 2 б і в та табл. 3). Теж саме стосується більшості локальних щільностей станів атомів заліза. Вони вносять основний вклад у величину щільності станів на рівні Фермі. Найбільший розрахований магнітний момент має сполука $Fe_{28}Al_4C_4$, а найбільші локальні магнітні моменти мають атоми заліза Fe^1 усіх сполук, які представлені на рис. 2 і 3, а також Fe^2 сполуки $Fe_{14}Al_2C_4$. Величини локальних щільностей станів атомів алюмінію і вуглецю на рівні Фермі невеликі. Слід також зазначити, що різному розташуванню атомів заліза й алюмінію в подібних модельних сполуках Fe_7Al_2C і $Fe_{14}Al_2C_4$ (рис. 2 а і 2 б) відповідають значні розходження в розподілі повних

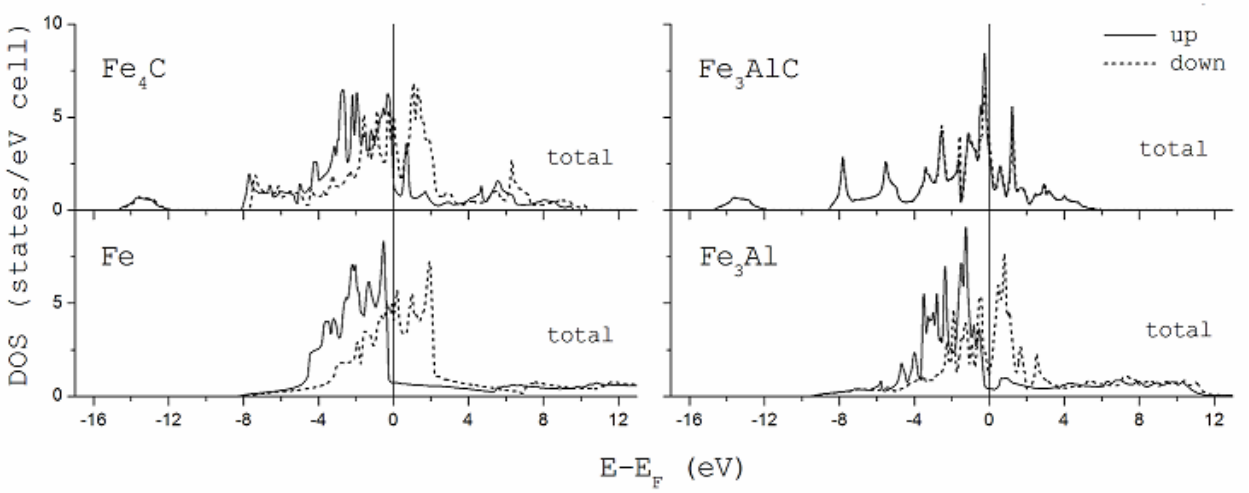


Рис. 4. Повна щільність станів для Fe_4, Fe_4C, Fe_3Al, Fe_3AlC (*а* = 0,375 нм).

і парціальних щільностей станів (рис. 3 а і б).

Для одержання додаткової інформації про вплив на електронну структуру атомів алюмінію, які заміщують атоми заліза у вершинах куба, та атомів вуглецю в октапорах були розраховані модельні кубічні структури Fe_4, Fe_4C, Fe_3Al і Fe_3AlC з раніше прийнятим параметром елементарної гратки a = 0,375 нм (рис. 4, табл. 1-4). На рис. 4 та з таблиці 3 видно, що наявності атомів вуглецю в найближчому оточенні атомів заліза в Fe_4C відповідає більш велика щільність станів на рівні Фермі, ніж для Fe_4, а наявності атомів алюмінію в Fe_3Al відповідає порівняно досить низька щільність станів на рівні Фермі. Досить явно простежується поширення 3d зони заліза завдяки гібридизації його 3d станів з 2p станами вуглецю та зниження значень щільності станів у приферміївській зоні завдяки заміщенню атомів заліза атомами алюмінію. Магнітні моменти на атомах вуглецю та алюмінію мають направлення "униз" в Fe_4C та Fe_3Al і їх зовсім не має в Fe_3AlC. Крім цього, магнітний момент атома заліза, що знаходиться в першій координаційній сфері атома вуглецю в Fe_4C, має меншу величину, ніж величина магнітного моменту еквівалентного йому атома заліза в Fe_4, а магнітний момент атома заліза, що знаходиться в другій координаційній сфері атома вуглецю, – більшу величину, ніж величина магнітного моменту еквівалентного йому атома заліза в Fe_4. Величини магнітних моментів атомів заліза, що оточують атом алюмінію в Fe_3Al, менші в порівнянні з величиною магнітного моменту атомів заліза в конфігурації Fe_4. Наявність алюмінію та вуглецю та їх вплив на магнітні моменти атомів заліза, утворюючих октаедричний каркас, призводить до повного зникання цих моментів на залізі у сполуці Fe_3AlC. Така кореляція величин магнітних моментів і розташувань атомів простежується також і для сполук з більш складною структурою Fe_7Al_2C, $Fe_{14}Al_2C_4$, $Fe_{25}Al_7C_4$ і $Fe_{28}Al_4C_4$.

IV. Висновки

Розрахунок електронної структури сполук $Fe_{25}Al_7C_4$ і $Fe_{28}Al_4C_4$ з модельними атомно-кристалічними структурами, близьких за складом до досліджених експериментально часток К-фази, підтвердив необхідність урахування нестехіометричності сполуки $Fe_{4-y}Al_yC_x$. Тільки в цьому випадку результати розрахунку корелюють з експериментальними даними.

Якщо вдасться одержати на практиці сплав стехіометричного складу Fe_3AlC, то в ньому, ймовірно, відбудеться зміна його ГЦК кристалічних ґрат на тетрагональні, магнітна структура яких буде переважно антиферомагніною, як це спостерігається в антиперовскитах на основі марганцю.

Андрющенко В.А. – д.ф.-м.н., старший науковий співробітник;
Бекеньов Л.В. – молодший науковий співробітник;
Антонов В.М. – д.ф.-м.н., професор, завідувач відділом Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України.

[1] Х.Д. Гольдшмидт. *Сплавы внедрения*. Мир, М., 424 с (1971).
[2] H. Stadeimaier, A. Fracker Stickstofflegierungen der T-Metalle Mangan, Eisen, Kobalt und Nickel mit gallium, germanium, indium und Zinn // *Z. Metallk.*, **53**, S. 48-51 (1962).
[3] D. Fruchart, E.F. Bertaut. Magnetic Stueties of the Metallic perovskite Type Compounds of Manganese // *J. Phys. Soc. Jpn.*, **44**(3), pp. 781-791 (1978).
[4] A. Kenmotsu, T. Shinohara, H. Watanabe. Nuclear Magnetic Resonanse of Ferromagnetic Mn_3AlC and Mn_3GaC // *J. Soc. Jpn.*, **32**(2), pp. 377-381 (1972)
[5] T. Kaneko, T. Kanomata, K. Shirakawa Pressure Effect on the Magnetic Transition Temperatures in the Intermetallic Compuonds M_3MC (M = Ga, Zn and Sn) // *J. Phys. Soc. Jpn.,* **56**(11), pp. 4047- 4055 (1987).
[6] F.R. Morral. The Constitution of Iron Rich Fe-Al-C Alloys // *J. Iron and Steel Inst.* **28**(5), pp. 419-428 (1934).
[7] K. Lohberg, W. Schmidt. Röntgenographische Untersuchungen über das System Fe-Al-C // *Archiv für das Eisenhüttenwesen*, **11**(12), pp. 607-614, (1938).
[8] С.Л. Кейз, К.Р. Ван Горн, Р. Кент. *Алюминий в чугуне и стали*. Металлургиздат, М. 491 с. (1959).
[9] М.Л. Бернштейн и А.Г. Рахштодт. *Металловедение и термическая обработка стали*. Справочник. Металлургиздат, М. 747 с. (1961).
[10] Л.С. Палатник, И.Л. Тананко, Ю.Г. Бобро. О природе ε-фазы в сплавах Fe-A1-C // *Кристаллография*, **2**(9), сс. 209-212 (1964).
[11] K. Nishida. Fe–Al–C Alloys // *Bul. Fac. Eng., Techn. Rept. Ноккаido Univ.*, (48) pp. 71-86 (1968).
[12] А.А. Гуляев, Ю.Д. Тяпкин. Электронно-микроскопическое исследование алюминиевой стали в высококоэрцитивном состоянии // *МиТОМ*, **4,** сс. 9-11 (1982).
[13] К. Дж Смитлз. *Металлы*, Металлургия, Москва 447 с. (1980).
[14] Ю.Г. Бобро. *Алюминиевые чугуны.* Изд-во Харьковского государственного университета. Харьков 193 с. (1964).
[15] А.Л. Ивановский, Р.Ф. Сабиянов, А.Н. Сказкин. Зонная структура и магнитные свойства антиперовскитов $M_3M'C$ (M = Mn, Fe; M′ = Zn, Al, Ga, Sn) // *ФММ,* **40**(9), сс. 1667-1670 (1998).

[16] J.H. Sim, S.K. Kwon, B.I. Min. Электронная структура маталличекого антиперовскитного соединения $GaCMn_3$ Физическое отделение Поханьского физико-технического университета. Корея. www.arxiv.org (cond-mat/0201328) (13.06.2002).
[17] К.С. Александров, Б.В. Безносиков. *Перовскитоподобные кристаллы (иерархия структур, многообразие физических свойств, возможности синтеза новых соединений)*. Наука, Новосибирск 216 с. (1997).
[18] К.С. Александров, Б.В. Безносиков. Архитектура перовскитоподобных кристаллов // *Кристаллография*, **42**(4), сс. 613-623 (1997).
[19] В.А. Андрющенко, В.И. Моравецкий, Л.М. Шелудченко. Кластерное моделирование электронной структуры карбидной фазы $Fe_{4-y}Al_yC_x$ в пара- и ферромагнитном состояниях // *УФЖ*, **37**(9), сс. 1406-1413 (1992).
[20] В.А. Андрющенко, В.И. Моравецкий, Л.М. Шелудченко. Кластерное моделирование электронной структуры карбидной фазы $Fe_{4-y}Al_yC_x$ // *ФТТ*, **36**(9), сс. 2565-2572 (1994).
[21] А.Л. Ивановский, И.С. Ефимов, А.А. Сказкин, В.М. Жуковский, Г.П. Швейкин. Зонная структура парамагнитных перовскитоподобных алюмокарбидов марганца и железа // *ФТТ*, **37**(12), сс. 3738-3743 (1995).
[22] А.Л. Ивановский. Электронная структура и зарядовые распределения в тройных карбидах $M_3M'C$ (M = Mn, Fe; M′ = Zn,Al, Sn, Ga) со структурой типа перовскита // *ЖНХ,* **41**(4), сс. 650 - 657 (1996).
[23] Л.И. Лысак, А.Г. Драчинская, В.А. Андрющенко. Влияние атомного упорядочения на фазовые и структурные изменения в высокоуглеродистых сплавах Fe-Al-C // *МиТОМ*., (7), сс. 20 - 21 (1986).
[24] В.А. Андрющенко, В.Г. Гаврилюк, В.М. Надутов. Атомное и магнитное упорядочение в *K*-фазе сплавов Fe-Al-C // *ФММ*, **60**(4), сс. 683-688 (1985).
[25] O. K Andersen. Liner methods in band theory // *Phys. Rev. B,* **12**(8), pp. 3060-3083 (1975).
[26] H.L. Skriver. *The LMTO Method*. Berlin. 281 p. (1984).
[27] U. Barth, L. Hedin. A Local exchange-correlation potential for the spin polarized case: I // *J. Phys.*, **5**(13), pp. 1629-1642 (1972).
[28] P.E. Blochl, O. Jepsen, O.K. Andersen. Improved tetrahedron method for Brillouin-zone integrations // *Phys. Rev. B,* **49,** pp. 16223-16233 (1984).
[29] В.А. Андрющенко, А.Г. Драчинская, Т.В. Ефимоваи др. Изменение магнитных свойств упорядоченной карбидной фазы в системе Fe-Al-C при охлаждении и нагреве // *УФЖ,* **37**(7), сс. 1057-1062 (1992).

V.A. Andryushchenko, L.V. Bekenov, V.N. Antonov

Structure and Electronic Properties of *K*-Phase

Institute of Metal Physics by G.V. Kurdyumov National Academy of Science of Ukraine,
36, blvd. Acad. Vernadsky, 03680, GSP, Kyiv-142, Ukraine

The crystal structure of antiperovskite compound $Fe_{4-y}Al_yC_x$ of nonstochiometric composition has been simulated taking into consideration the possibility of substitution the carbon atoms in the octahedral pores by vacancies and the aluminum atoms in the vertexes of parallelepiped by iron atoms. The electronic structure has been calculated and the magnetic properties of simulated antiperovskites, which are close to the real antiperovskite crystals according to structure, have been analyzed.