

В.А. Андрущенко, Л.В. Бекенъов, Т.О. Шаповал

МОДЕЛЮВАННЯ ЕЛЕКТРОННОЇ СТРУКТУРИ Fe_{3-x}Al_xC_x-ФАЗИ МЕТОДОМ ЛТМО.

Методом ЛТМО виконали розрахунок електронної структури для модифікації Fe_{4-y}Al_yC_x-фази без спінової поляризації. Ці модифікації відрізняються різною кількістю атомів алюмінію і заліза і відповідають пара- і ферромагнітним станам досліджуваної фази. Побудували повні та парціальні щільності електронних станів. Виявили збільшення гібридизації р-електронів алюмінію і вуглецю з електронами заліза, якщо збільшувати концентрацію алюмінію.

Вступ

Після повільного охолодження сплавів Fe-Al-C до кімнатної температури [1] або після загартування їх від 1000-1300°C у воду [2,3] або після швидкісного загартування розплавів Fe-Al-C на металевий барабан, що швидко обертається [4,5], у широких концентраційних температурних інтервалах у твердому розчині фіксується прямим структурними методами (мікроскопічним, рентгенографічним, електронографічним) карбідна фаза зі структурою типу перовскіта.

По одинці типи кристалічних ґраток для Fe, Al і C різні.

Кристалічна ґратка заліза (атомний номер 26, атомна маса 55.87) може знаходитися в двох модифікаціях: Fe_α (< 900°C > 1400°C), тип структури A2 і Fe_γ (900÷1400°C), тип структури A1 [6].

A1 це кристалічна ґратка типу Cu, кубічна: Oh₅ (позначення просторової групи по Шенфлісу) - Fm3m (скорочене позначення просторової групи по Герману-Могену), кількість атомів в елементарній комірці - 4, координати атомів: 4 Cu (Oh): 000; $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$; \downarrow .

A2 - кристалічна ґратка типу W, кубічна: Oh₉ - Im3m, кількість атомів у комірці - 2, (> 1400°C), координати атомів 2W(Oh): 000. $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$

Кристалічна ґратка алюмінію (атомний номер 13, атомна маса 26.98154) має такий же тип ґратки A1, як Fe_γ, однак більший параметр елементарної комірки.

Кристалічна ґратка вуглецю (атомний номер 6, атомна маса 12.011) може знаходитися в двох модифікаціях A4 і A9.

Кристалічна ґратка типу діаманту A4: кубічна: Oh₇ - Fd3m, кількість атомів в елементарній комірці - 8, їх координати 8C (Td): 000; $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$; $\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4}$; \downarrow .

Кристалічна ґратка типу графіту може бути:

а) гексагональна: $D46h - P63/mmc$ (якщо $z = 0$) або $C46h - P63/mmc$ ($z = 0$), кількість атомів у комірці - 4, координати: $2C (D3h$ або $C3h)$: $000; 00 \frac{1}{2}$; $2C (D3h$ або $C3h)$: $\frac{1}{3} \frac{2}{3} z$; $\frac{2}{3} \frac{1}{3} (\frac{1}{2} + z)$, $z \approx 0$ (або $z = 0$);

б) ромбоедрична: $D53h - R3$ m, кількість атомів у комірці - 6, координати: $6C(C3h)$: $(000; \frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{3}; \frac{1}{3} \frac{2}{3} \frac{2}{3}) \pm (00x)$ із $x \approx \frac{1}{6}$ (або $x = \frac{1}{6}$).

За певних умов у твердому розчині атомів Fe, Al і C можуть виникати різні метастабільні складові, що відрізняються видом будівництва, типом і параметрами кристалічної ґратки:

- | | |
|---|--|
| 1) FeAl (β_2), B2; | 7) Fe ₂ C, гексагональна; |
| 2) Fe ₂ Al (β_1), DO3; | 8) Fe ₃ C, DO1(цементит); («в»), гекс.; |
| 3) Fe ₂ Al + C0 ₅ , L'12; | 9) ε-Fe, гексагональна P36 22; |
| 4) Fe ₆ Al ₁₂ C, L'12; | 10) Fe (+ C), L'2 (тетрагональна спотворена), |
| 5) AlFe ₃ C, L'12; | мартенсит при низьких температурах, |
| 6) Fe ₂₁ C ₆ , орторомбічна ґратка, (M = 4) або гексагональна (M' = 8); | 11) Fe (+ C), Al (аустеніт); а також Al ₄ C ₃ , D7 (ромбоедрична). |

Навіть розплави Fe-Al-C мікронеоднорідні. При температурі 1550°C рентгенографічно виявляється існування атомних мікрогрупувань двох типів [7]. По-перше, атоми заліза утворюють ближній порядок по типу ОЦК-структури з ймовірною присутністю атомів вуглецю. По-друге, реалізується ближній порядок типу перовскіта (CaTiO₃) із ГЦК-структурою - Fe₃Al (К-фаза) - із щільною упаковкою атомів металу. Збільшення концентрації атомів алюмінію приєє підвищенню частки атомів, що утворюють мікрогрупування іншого типу. Тому при будь-яких швидкостях загартування не вдається зафіксувати аморфний стан у цих сплавах.

Модуляція, яка виникає в розплаві при охолодженні, реалізується вигляді упорядкованого розташування частинок К-фази в об'ємі сплаву вздовж напрямків {100} [8,9], а також в атомному і магнітному порядкуванні в самих частинках К-фази [10,11]. Тип її кристалічної структури [6]: L'12, кубічна: Oh1 - Pm3m ($P \frac{4}{m} 3 \frac{2}{m}$); $a = 3.76$; $M \approx 5$; координати атомів: 1Al (Oh): 000, 3Fe (D4h): $\frac{1}{2} 00$; \downarrow від 0.6 до 0,9 C (Oh)

000 $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$

Було встановлено, що К-фаза може зберігати свою ГЦК-структуру при значному дефіциті не тільки атомів вуглецю, але й атомів алюмінію [10]. Тому формулу її вірніше представляти не у вигляді Fe_3Al , а у вигляді $Fe_{1-x}Al_xC_x$ [10,11]. При певних хімічних складах або певних температурах К-фаза може знаходитися в пара- або феромагнітному станах [12]. У тому випадку, коли вона когерентна з навколишньою матрицею, структурний стан самої К-фази (розмір когерентних частинок, атомний порядок і магнітострикція (у випадку параферомагнітного переходу)) визначає особливості структурного стану (наприклад, аномально високу тетрагональність мартенситу або аномально високу тетрагональність свіжеутвореного мартенситу [13]) і фізичні властивості сплаву в цілому [14,15]. У зв'язку з цим цікаво було дослідити електронну структуру К-фази в пара- і феромагнітному станах. У попередніх роботах електронну структуру К-фази досліджували методом кластерного моделювання [16-19]. Було створено математичні моделі, проведено квантово-механічні розрахунки проаналізовано характер впливу алюмінію на магнітну поведінку К-фази. У якості моделей для чисельного розрахунку в роботах [16-18] використовували два кластери елементарної комірки К-фази (рис. 1)

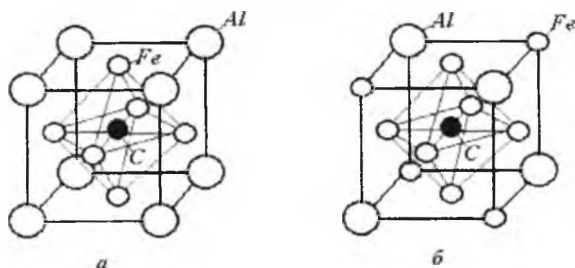


Рис. 1 Конфігурації кластерів Fe_6Al_8C (а) і $Fe_{10}Al_4C$ (б)

Перша комірка відповідала сполуці Fe_3AlC (рис.1, а). Якщо такий кластер є елементом, що періодично повторюється, то в побудованому в такий спосіб кристалі ступінь дальнього порядку дорівнює одиниці, а масові частки Al і C складають 13 і 5,8% відповідно. Частинки К-фази при такій концентрації Al феромагнітні. Тепер по-іншому оберемо розташування атомів Al на вершинах куба. Чотири атоми залишаємо на місцях так, що вони утворюють тетраедр, а інші чотири замінюємо на атоми Fe, причому вони також утворюють тетраедр, але центрально-

симетричний відносно алюмінієвого (рис. 1,б). Якщо що конфігурацію періодично повторювати в просторі, то в отриманому кристалі ступінь шильного порядку також буде дорівнювати одиниці, а масовий склад Al і C буде складати 6,1 і 5,4%. Цей кластер буде відповідати парамагнітному стану.

Розрахунки електронної структури таких кластерів були виконані ми допомогою методу багаторазоворозсіяних хвиль (X_α -PX), запропонованого Джонсоном і Смітом [20,21]. Кластер розподіляється на атомну зону I - простір, замкнений в атомних сферах, зону III - за сферою Ватсона, що оточує весь кластер, і зону II - міжсферний простір. Потенціал усередині сфер і за сферою Ватсона обирається сферично-симетричним, а в міжсферному просторі - постійним. Хвилясті функції $\Psi_j(r)$ визначаються чисельним інтегруванням рівняння Шредінгера в даному потенціалі. Із умови безперервності хвилястих функцій і їхніх перших похідних на межах зон визначається система секулярних рівнянь, що має нетривіальне рішення при визначених значеннях енергії, що і є власними значеннями енергії одноелектронних станів. Відповідні хвилясті функції $\Psi_j(r)$ дозволяють одержати нові електронну шильність і потенціал, а отже, знаходити самоузгоджене рішення рівняння Шредінгера. Розкладання по парціальним хвилям у методі X_α -PX швидко сходиться так, що досить використовувати невеликі значення орбітальних квантових чисел l (звичайно $l \leq 3$).

У наших обчисленнях ми використовували вирази для обмінного

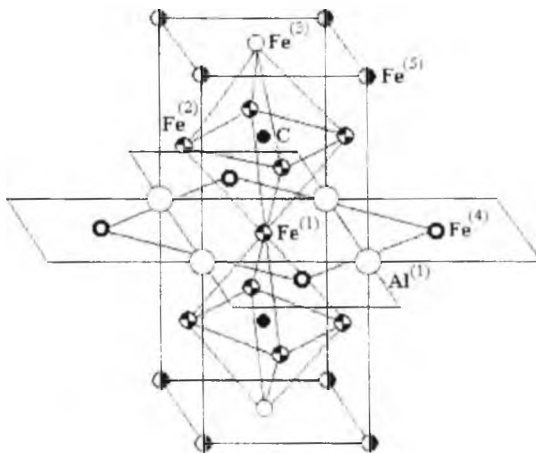


Рис. 2. Один з кластерів, який використовували в розрахунках. Другий відрізняється від цього заміною $Fe^{(3)}$ на $Al^{(2)}$.

потенціалу, отримані в [21-23]. Вони більш точно відображають

поводження обмінного потенціалу в зоні металевих щільностей, ніж звичайний вираз із α -параметром. Для одержання стартових потенціалів використовували хвилясті функції Германа-Скіллмана [24]. Більш детальний опис є у роботі [25].

Для двох кластерів, які нас цікавлять був обраний параметр ґратки $a = 3,75 \text{ \AA}$, що є середнім значенням, отриманим при рентгенографічних дослідженнях [10]. Хоча в реальній ґратці К-фази параметр елементарної комірки із збільшенням концентрації Al зменшується, вибір однакового параметру дозволив моделювати вплив на електронну структуру тільки заміщення атомів Fe на атоми Al. Обрані кількості атомів у кластерах відповідали наступним хімічним складам: Fe_7Al і $\text{Fe}_{15}\text{Al}_6\text{-C}$. Радіус muffin-tin-сфери (MT-сфери) для C $R_C = 0,96 \text{ \AA}$, радіус цієї ж сфери для Fe, що знаходиться на гранях елементарної комірки, $R_{Fe} = 0,92 \text{ \AA}$. Такі розміри обрані з умови рівності потенціалів Fe і C в точці контакту цих сфер. Радіус MT-сфери для Al $R_{Al} = 1,73 \text{ \AA}$. У іншому кластері при заміщенні половини атомів Al на атоми Fe радіус MT-сфер для них складав $1,05 \text{ \AA}$. Це викликано тим, що атом Fe, хоча і знаходиться на кутах куба, але по розмірах MT-сфери не повинен сильно відрізнятись від атомів Fe, що знаходяться в центрах граней.

Аналіз отриманих енергетичних розподілів повної щільності станів обох кластерів, парціальних s-, p-, d-щільностей станів атомів Fe, Al і C, карт розподілу електронної щільності дозволив дійти висновку, що при збільшенні концентрації Al відбувається сильна p-d-гібридизація хімічних зв'язків Fe у першій координаційній сфері і Al в другій. Був зроблений висновок про те, що відповідно до теорії Стонера упорядкована фаза схильна до переходу з пара- у феромагнітний стан при збільшенні концентрації Al.

Далі в роботі [17] було проведено спін-поляризований розрахунок описаних вище двох кластерів. Він привів до таких же висновків, що були зроблені після неспін-поляризованого розрахунку.

Розрахунок електронної структури двох двадцятидев'ятиатомних кластерів (мал. 2) без врахування спінової поляризації також підтвердив наявність сильної гібридизації між p-електронами алюмінію і d-електронами заліза.

У нинішній роботі була поставлена задача ще раз проаналізувати результати проведених раніше розрахунків і, крім цього, додатково провести розрахунки електронної структури К-фази в пара- і феромагнітних станах за допомогою методу лінеаризованих MT-орбіталей (ЛМТО) у скалярно-релятивістському наближенні без урахування спінової поляризації.

Методика розрахунку

Були проведені самоузгоджені розрахунки електронної структури карбідної фази $Fe_{4-x}Al_xC_x$ (К-фази) для двох різних її модифікацій, що

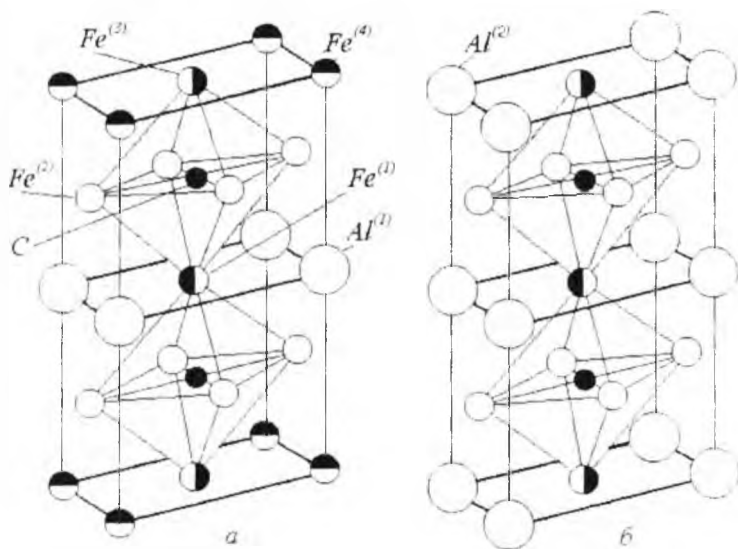


Рис. 3 Модельні конфігурації атомів $Fe_{19}Al_4C_2$ (а) і $Fe_{11}Al_{12}C_2$ (б)

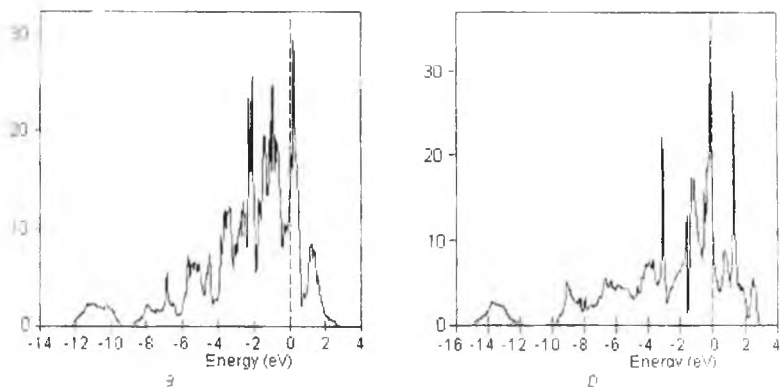


Рис. 4 Сумарні щільності електронних станів для атомних конфігурацій $Fe_{19}Al_4C_2$ (а) і $Fe_{11}Al_{12}C_2$ (б).

мають однакову геометричну структуру, але відрізняються хімічним складом. Кристалографічна група цього сполучення - $R\bar{4}/m\bar{3}m$. Його елементарна комірка є тетрагональною і зображена на мал. 3. Параметри комірки, при яких робився розрахунок, такі: $a = 3.75 \text{ \AA}$, відношення $c/a = 2$. Дві різні модифікації К-фази утворюються шляхом заміни атомів заліза, що знаходяться у вершинах паралелепіпеду (усі $\text{Fe}^{(4)}$ на малюнку), на атоми алюмінію. Розрахунки проводили за допомогою методу лінійних МТ-орбіталей (ЛМТО) [26]. У рамках підходу, заснованого на теорії функціоналу електронної щільності [27,28], для визначення енергетичної структури кристала вирішується одноелектронне рівняння Шредінгера з ефективним кристалічним потенціалом, що залежить від електронної щільності і враховує обмінно-кореляційну взаємодію в рамках наближення локальної щільності [21,27,28]. Хвиляста функція $\Psi_j(r, \vec{k})$ електрона в кристалі представляється у виді розкладання по спеціально обраному базовому набору функцій - енергетично незалежним МТ-орбіталям. Коефіцієнти цього розкладання повинні задовольняти умові безперервності і гладкості хвилястої функції у всьому просторі. Базисний набір функцій будується на основі МТ(muffin-tin) наближення для кристалічного потенціалу наступним чином: простір, що займається кристалом, розбивається на дотичні сфери з центрами в атомних точках і міжсферну область; усередині кожної сфери потенціал покладається сферично симетричним, а в проміжній області - має постійну величину. У кожній з цих областей МТ-орбітали мають свій вигляд, що задається рішенням рівняння Шредінгера усередині сфер і рівняння Лапласа поза сферами. Знайдені в результаті рішень одноелектронного рівняння Шредінгера хвилясті функції $\Psi_j(r, \vec{k})$ дозволяють одержати нову електронну щільність і, відповідно, кристалічний потенціал, а отже, проводити процедуру самоузгодження. Метод ЛМТО має винятково високу збіжність по орбітальному квантовому числу l , так що при проведенні розрахунків обмежуються їхніми невеликими значеннями (звичайно $l \leq 3$ або $l \leq 2$). Для рішення одноелектронного рівняння Шредінгера використовували скалярно-релятивістське наближення методу ЛМТО [29] без врахування спінової поляризації. Розрахунок проводився в наближенні атомної сфери (ПАС) із комбінованими поправками [26,30]. У цьому наближенні дотичні МТ-сфери замінюються на атомні сфери, що перекриваються, радіуси яких визначаються з умови $S = (3\Omega_0/4\pi)^{1/3}$, де Ω_0 - об'єм комірки Вігнера-Зейтца. При проведенні обчислювань для кожної модифікації К-фази були обрані свої радіуси атомних сфер. Для модифікації, що має елементарну комірку, яка відображена на малюнку 1, вони мають наступні значення: $\text{Fe}^{(1)} - 0.90 \text{ \AA}$; $\text{Fe}^{(2)} - 1.57 \text{ \AA}$; $\text{Fe}^{(3)} - 0.90 \text{ \AA}$; $\text{Fe}^{(4)} - 1.60 \text{ \AA}$; $\text{Al} - 1.54 \text{ \AA}$; $\text{C} - 0.67 \text{ \AA}$. У випадку модифікації з атомами Al замість

атомів Fe^{4+} радіуси атомних сфер дорівнюють: для заліза - 1.15 Å, для алюмінію - 1.91 Å, для вуглецю - 1.01 Å.

Для обмінно-кореляційного потенціалу в наших обчисленнях використовували інтерполяційну формулу Барта-Хедіна (Barth-Hedin) [22]. Вхідну щільність заряду для кожної наступної ітерації будували з використанням результатів декількох попередніх ітерацій за схемою Бройдена.

Інтегрування у k просторі здійснювали на основі поліпшеного методу тетраєдрів [31]. Самоузгодження було досягнуто з використанням 105 точок у незведеній частині зони Бріллюена.

Обговорення результатів

Сумарні щільності електронних станів обох атомних конфігурацій наведені на мал. 4. Ці спектри по своєму вигляду близькі до отриманих

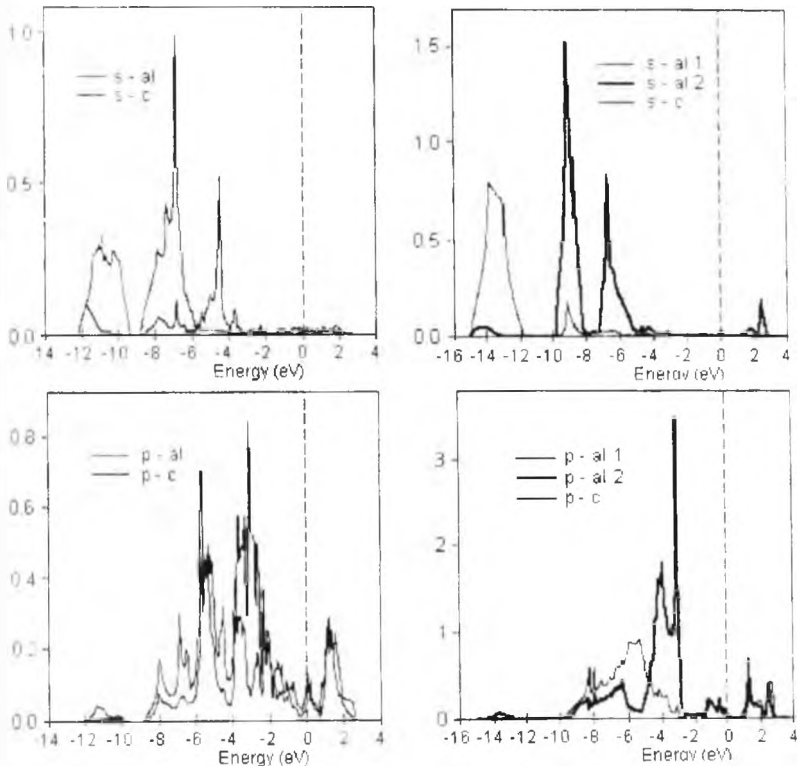


Рис. 5. Парціальні s -, p -щільності станів атомів Al та C
 а – модифікація $Fe_{19}Al_4C_2$ (парамагнітний стан К-фази),
 б – модифікація $Fe_{11}Al_{12}C_2$ (феромагнітний стан К-

в роботах [16-18]. Порівняння електронних спектрів двох конфігурацій (рис. 4) дозволяє виявити в обох випадках вузьку d-смугу поблизу рівня Фермі, а також, у випадку феромагнітної конфігурації, ще одну вузьку d-смугу за рівнем Фермі. На мал. 4б сумарний спектр щільностей електронних станів більш локалізований, ніж на мал. 4а. На мал. 5 зображені розраховані парціальні щільності s- і p-електронів атомів Al і C для випадку парамагнітної і феромагнітної конфігурацій. Видно, що у випадку атомної модифікації $Fe_{11}Al_{12}C_2$, внесок s- і p-електронів атомів Al і C більше, ніж у випадку модифікації $Fe_{19}Al_4C_2$. Крім цього, спектри на мал. 5а більш розмиті, ніж на мал. 5б, однак мають меншу енергетичну зону. Внесок p-електронів атомів Al і C у щільність електронних станів за рівнем Фермі досить значна у випадку феромагнітного стану. Аналогічні зміни можна встановити з аналізу парціальних s-, p-, d-щільностей станів атомів Fe (рис.6). Видно, що d-електрони атомів Fe вносять основний внесок у сумарну щільність електронних станів атомів за рівнем Фермі, однак, у випадку феромагнітного стану, спектр більш значний по енергії і має вузьку d-смугу, якої немає у випадку парамагнітного стану. Окрім цього, в даному випадку вклади атомів $Fe^{(1)}$, $Fe^{(2)}$, $Fe^{(3)}$ однакові у різних за величиною спектрах s-, p-, d-електронних щільностей і кожному з атомів в цих спектрах електронних щільностей відповідає одна й та ж сама спектральна лінія (мал. 6б). Теж саме стосується s- і p-електронних щільностей атомів $Al^{(1)}$ і $Al^{(2)}$ (рис. 5б). У випадку парамагнітної модифікації кожен атом $Fe^{(1)}$, $Fe^{(2)}$, $Fe^{(3)}$, $Fe^{(4)}$ має свій окремий спектр s-, p-, d-електронних щільностей, який охайомлює відповідна окрема лінія (рис. 6а). Спектр парціальної d-електронної щільності станів атома $Fe^{(4)}$ відрізняється від спектрів атомів $Fe^{(2)}$, $Fe^{(3)}$, $Fe^{(4)}$ і суттєво змінює свій вигляд по відношенню до вигляду спектрів парціальних d-електронних щільностей станів атомів атом $Fe^{(1)}$, $Fe^{(2)}$, $Fe^{(3)}$, які знаходяться в феромагнітній конфігурації. В парамагнітній модифікації d-електрони атома $Fe^{(4)}$ в значно більшій мірі послаблюють p-d-гібридизацію з p-електронами атомів Al і C, ніж d-електрони атомів $Fe^{(1)}$, $Fe^{(2)}$, $Fe^{(3)}$. Цей факт неочікуваний, бо найближче оточення атома $Fe^{(4)}$ іншими атомами в обох модифікаціях залишається незмінним. Порівнюючи величини парціальних щільностей для різних енергій, можна зробити висновок, що у випадку феромагнітної атомної модифікації $Fe_{11}Al_{12}C_2$ спостерігається значна p-d-гібридизація d-електронів атомів $Fe^{(1)}$, $Fe^{(2)}$, $Fe^{(3)}$ (при чому всі атоми дають однакові внески) з p-електронами атомів $Al^{(1)}$ і $Al^{(2)}$ і C (p-електрони атомів атоми Al і C вносять майже порівну внесок у цю гібридизацію). Це є причиною взаємного розширення енергетичних спектрів для валентних електронів атомів заліза, алюмінію та вуглецю.

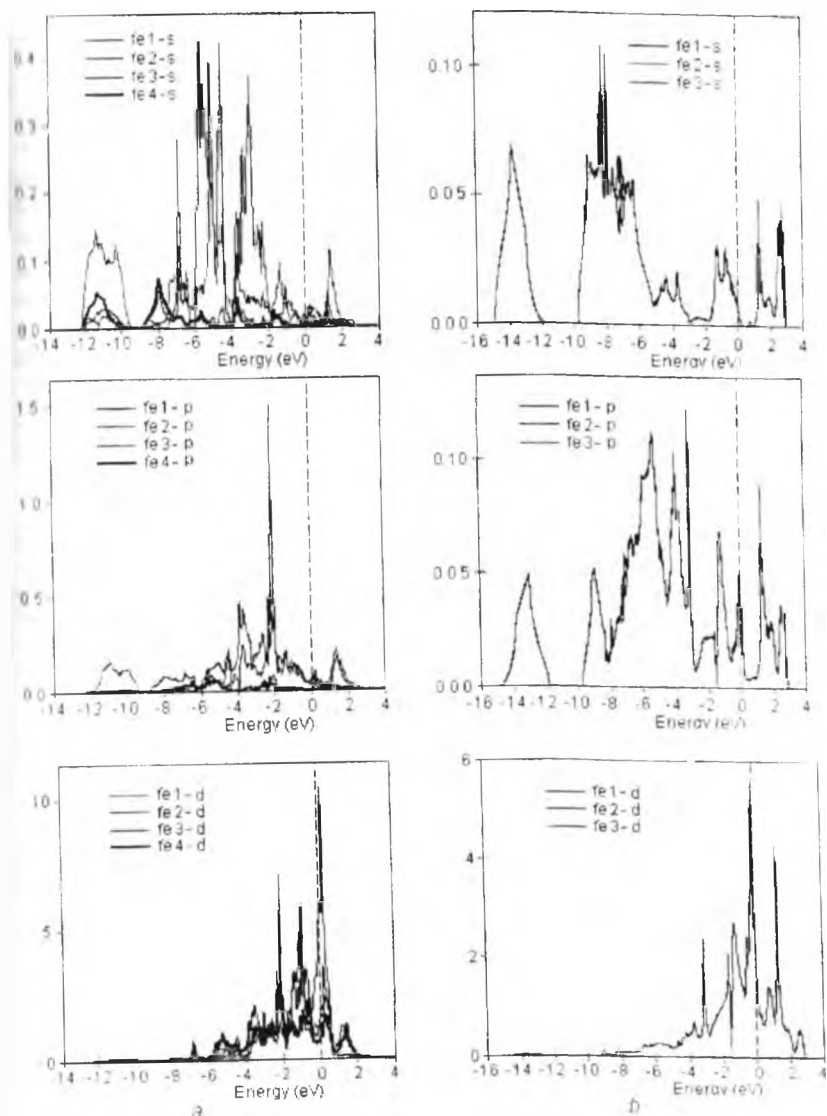


Рис. 6. Парціальні s-, p-, d-щільності станів атомів Fe:
 а – модифікація $Fe_{19}Al_4C_2$ (парамагнітний стан К-фази)
 б – модифікація $Fe_{11}Al_{12}C_2$ (феромагнітний стан К-фази)

Самоузгоджені розрахунки, без урахування спінової поляризації електронів, показали, що модельним атомним модифікаціям, які відповідають пара- і ферромагнітним станам, відповідають різні, як сумарні, так і парціальні електронні щільності атомів заліза, алюмінію та вуглецю. Для парамагнітного випадку спектр щільностей електронних станів більш розмитий, але менший за величиною. У ферромагнітному випадку фіксується додаткова вузька d-смуга за рівнем Фермі, яка відповідає вкладу d-електронів заліза. Крім цього, розподіл щільності станів електронів всіх атомів $Fe^{(1)}$, $Fe^{(2)}$, $Fe^{(3)}$ ферромагнітної модифікації по енергіям однаковий. Теж саме стосується атомів алюмінію. У випадку парамагнітної модифікації кожен атом $Fe^{(1)}$, $Fe^{(2)}$, $Fe^{(3)}$, $Fe^{(4)}$ має свій окремий спектр s-, p-, d-електронних щільностей, який огинає відповідна окрема спектральна лінія.

Атомній модифікації ферромагнітного стану відповідає p-d-гібридація, відповідно, d-електронів атомів заліза і p-електронів атомів алюмінію і (в однаковій мірі з останнім) атомів вуглецю.

The electronic structure of two modifications of $Fe_{4-x}Al_xC$. – phase has been calculated using the LMTO method without spin polarization. The modifications differ by various amount of aluminium and iron atoms and correspond to the para- and ferromagnetic states of the phase in question. Total and partial densities of electronic states have been constructed. Magnification of hybridization of p-electrons of aluminium and carbon with d-electrons of iron with increase of concentration of aluminium has been observed.

1. Кейз С.Л., Ван Горн К.Р., Кент Р. Алюминий в чугунах и сталях. – М.: Металлургиздат. – 1959. – 123 с.
2. Morral F.R. // J. Iron and Steel Inst. – 1934. – 28. – N 5. – P. 419 – 428.
3. Nisida K. // Techn.Rept. HoKKaido Univ. – 1968. – N 48. – P. 71.
4. Inoue A., Minemura T., Kitamura A., Masumoto T. // Metl. Trans. – 1981. – V. 12. – N 6 – P. 1041.
5. Георгиева И.Я., Матюшенко Л. А., Суязов А. В. и др. // ФММ. – 1990. – Т.69. Вып.10. – С. 155 – 162.
6. Смитлз К. Дж. Металлы: Справ. изд. - Москва, «Металлургия». – 1980. – 447 с.
7. Михайлова Л.Е., Христенко Т.М., Романова А. В. и др. // Металлофизика. 1992. – Т. 14. - № 2. – С. 46 – 52.
8. Тяпкин Ю.Д., Гуляев А.А., Георгиева И.Я. // ФММ. – 1977. – 43. – Вып. 6. – С. 1297.
9. Гуляев А.Л., Тяпкин Ю. Д. // МиТОМ. – 1982. – Т.4. - С. 9 – 11.
10. Лысак Л.И., Драчинская А.Г., Андрущенко В.А. Влияние атомного упорядочения на фазовые и структурные изменения в высокоуглеродистых сплавах Fe–Al–C // МиТОМ. – 1986. – № 7. – С. 20 – 21.

- 11 Андрущенко В.А., Гаврилук В.Г., Надутов В.М. Атомное и магнитное упорядочение в *K*-фазе сплавов Fe-Al-C // ФММ. – 1985. – Т. 60. – Вып. 4. – С. 683 – 688.
- 12 Андрущенко В.А., Драчинская А.Г., Ефимова Г.В. и др. // УФЖ. – 1992 – Т. 37. – № 7. – С. 1057–1062.
- 13 Лысак Л.И., Драчинская А.Г., Сторчак Н. В. Влияние упорядочения в аустените на мартенситное превращение в сталях Fe-Al-C // ФММ. – 1972. – Т. 34. – Вып. 2. – С. 339–346.
- 14 Андрущенко В.А., Драчинская А.Г., Ефимова Г.В., Полотнюк В.В. Влияние структурных изменений на магнитные свойства сплавов Fe-Al-C при их охлаждении и нагреве // УФЖ. – 1988 – Г. 1988. – № 5. – С. 772–776.
- 15 Андрущенко В.А., Бекенев Л.В., Гнатюк И.Е. Изменение электросопротивления при нагреве высокоуглеродистых сплавов Fe-Al-C // Металлофизика и новейшие технологии. – 2000. – Т. 22. – № 12. – С. 10–17.
- 16 Андрущенко В.А., Моравецкий В.И., Шелудченко Л.М. Кластерное моделирование электронной структуры карбидной фазы $Fe_{1-y}Al_yC_x$ в пара- и ферромагнитном состоянии // УФЖ. – 1992. – Т. 37. – № 9. – С. 1406–1413.
- 17 Моравецкий В.И., Андрущенко В.А., Шелудченко Л.М. Спин-поляризованный вариант расчета электронной структуры кластеров *K*-фазы в системе Fe-Al-C // УФЖ. – 1994. – Т. 39. – № 2. – С. 244–248.
- 18 Moravetski V.I., Andryuschchenko V.A. and Sheludchenko L.M. Computer Simulation of The Electronic Structure of the $Fe_{1-y}Al_yC_x$ Carbide Phase in its Para- and Ferromagnetic States // J. Phys. Chem. Solids. – 1994. – Vol. 55. – N 2. – P. 195–200.
- 19 Андрущенко В.А., Моравецкий В.И., Шелудченко Л.М. Кластерное моделирование электронной структуры карбидной фазы $Fe_{1-y}Al_yC_x$ // ФТТ. – 1994 – Т. 36. – № 9. – С. 2565–2572.
- 20 Jonson K. H., Smith F.G., Jr. // Phys. Rev. Lett. – 1970. – V. 24. – N 4. – P. 139–142.
- 21 Hedin L., Lundqvist B. I. // J. Phys. C. – 1971. – V. 4. – N 14. – P. 2064–2083.
- 22 Barth U., Hedin L. // J. Phys. C. – 1972. – V. 5. – N 13. – P. 1629.
- 23 Gunnarsson O., Lundqvist B. I. // Phys. Rev. B. – 1976. – 13, N 10. – P. 4274–4298.
- 24 Herman F., Skillman S. // Atomic Structure Calculation. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J. – 1963.
- 25 Slater J.C. The Calculation of Molecular Orbitals. New York: John-Wiley, 1979.
- 26 Andersen O. K. Linear methods in band theory. // Phys. Rev. B. – 1975. – V. 12. – P. 3060–3083.
- 27 Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas // Phys. Rev. B. – 1964. – V. 136 – P. 864–871.
- 28 Kohn W., Sham L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects // Phys. Rev. A. – 1965. – V. 140 – P. 1133–1138.
- 29 Nemoshkalenko V. V., Krasovsky A. A., Antonov V. N., Antonov V. N., Fleck U., Wonn H. and Ziesche P. // Phys. Status Solidi B. – 1982. – V. 120. – P. 283.
- 30 Andersen O. K., Jepsen O. // Phys. Rev. Lett. – 1984. – V. 53. – P. 2571.
- 31 Blochl P. E., Jepsen O., Andersen O. K. Improved tetrahedron method for Brillouin-zone integrations. // Phys. Rev. B. – V. 49. – P. 16223–16233.