

# ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ СОЕДИНЕНИЙ $V_{0,50}Ru_{0,50}$ И $V_{0,55}Ru_{0,45}$

*В. И. Анисимов, М. А. Коротин, Э. З. Курмаев*

Методом функций Грина в приближении атомных сфер (ASA—KKR) проведен расчет электронной структуры интерметаллида  $VRu$  (решетка CsCl) как при стехиометрическом составе, так и при малом (до 5%) отклонении от стехиометрии. Полученные результаты использованы для интерпретации рентгеновских эмиссионных  $K_{\beta}$ -спектров  $V$  этих соединений. Рассмотрено влияние ближайшего окружения излучающего атома в кристалле на электронную структуру и форму экспериментальных эмиссионных спектров.