

## ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КЛАТРАТОВ $\text{Na}_8\text{Si}_{46}$ , $\text{Ba}_8\text{Si}_{46}$ И ГИПОТЕТИЧЕСКОГО КЛАТРАТА $\text{Mo}_8\text{Si}_{46}$

*Борщ Н. А., Переславцева Н. С., Курганский С. И.*

В работе представлены результаты расчета электронной структуры кремний – металлических клатратов  $\text{Na}_8\text{Si}_{46}$ ,  $\text{Ba}_8\text{Si}_{46}$  и гипотетического клатрата  $\text{Mo}_8\text{Si}_{46}$ . Расчет проводился методом линеаризованных присоединенных плоских волн. В результате были получены зонные картины клатратов, полные и парциальные плотности электронных состояний, а также рентгеновские эмиссионные Si  $K_{\beta 1,3}$ - и Si  $L_{2,3}$ -спектры. Для клатрата  $\text{Na}_8\text{Si}_{46}$  приводится сравнение рассчитанных Si  $K_{\beta 1,3}$  - и Si  $L_{2,3}$  - спектров с экспериментальными.