

основного состояния. Это — частный случай общей *теоремы Яна — Теллера*, согласно которой всякая структура атомов с вырожденным основным состоянием системы электронов нестабильна, за исключением чисто спинового вырождения или линейной структуры атомов. С примером этого мы познакомились в предыдущем параграфе. Относительно общего представления об эффекте Яна — Теллера см. Штурге [101.20].

В качестве примера теории внутрикристаллического поля рассмотрим атом, имеющий два d -электрона вне замкнутых оболочек, в первичной решетке кубической симметрии (O_h). Пренебрегаем спин-орбитальным взаимодействием и ограничиваемся, вследствие этого, двумя случаями *). Обсуждаем результаты, пользуясь рис. 23. Система обозначений, использованная там для идентификации энергетических уровней, следующая: A_1 и A_2 суть одномерные представления, E — двумерное, а T_1 и T_2 — трехмерные представления. Кратность $2S + 1$ приведена сверху слева. Индекс g относится к положительной четности.

Начинаем со случая *слабого внутрикристаллического поля*. Тогда, в качестве первого шага, мы должны рассмотреть расщепление двукратно заполненного d -уровня в свободном атоме. Расщепление возникающих уровней во внутрикристаллическом поле учитывается впоследствии. В данном атоме каждый d -электрон имеет десять состояний с квантовыми числами $l = 2, m = -2, -1, 0, 1, 2, s = \pm 1/2$. Электроны, подчиняясь принципу Паули, могут занимать 45 различных состояний. Эти состояния классифицируются по их полному орбитальному угловому моменту L и полному спину S . Имеется одно 1S -состояние с $L = S = 0$, девять 3P -состояний с $L = S = 1$, пять 1D -состояний с $L = 2, S = 0$, двадцать одно 3F -состояние с $L = 3, S = 1$ и девять 1G -состояний с $L = 4, S = 0$. d^2 -терм (рис. 23 слева) расщепляется на пять уровней, классифицируемых по различным значениям L . Имеющее место дальнейшее расщепление обусловлено внутрикристаллическим полем. В то время как 1S - и 3P -термы остаются синглетными, 1D -терм расщепляется на два, 3F -терм на три, а 1G -терм — на четыре энергетических уровня. На рис. 23 (слева) показано расщепление, рассчитанное отдельно для обоих взаимодействий. Рассмотрение так называемого взаимодействия уровней улучшает результаты: энергетические уровни с идентичными свойствами симметрии (здесь — два A_{1g} -терма, два E_g -терма и два T_{1g} и T_{2g} -терма) «отталкивают друг друга». Это создает значительное смещение энергетических уровней.

Мы не хотим детально рассматривать случай *сильного внутрикристаллического поля*. На рис. 23 (справа) показаны отдельные этапы приближения, которые приводят окончательно к тому же самому результату.

*) Автор имеет в виду два остающихся при таком пренебрежении случая вместо упомянутых выше трех. (Примеч. пер.)