

Энергетические уровни на рис. 23 и этапы приближений, которые к ним приводят, вычислены с тремя заданными параметрами: расщеплением Δ между $(t_{2g})^2$ - и $(e_g)^1(t_{2g})^1$ -термами и двумя «парамет-

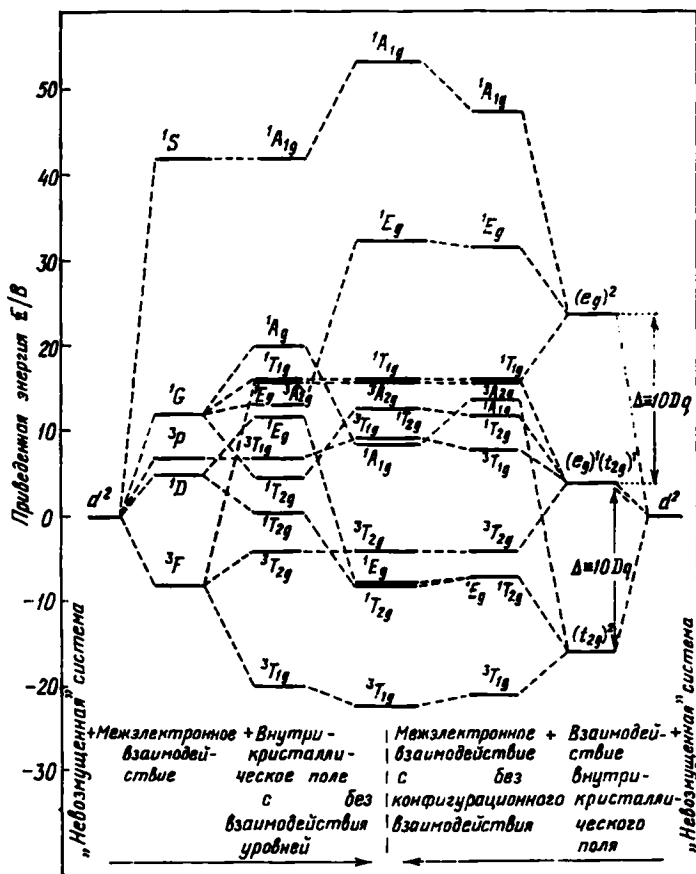


Рис. 23. Этапы приближенного расчета расщепления d^2 -терма в кубической решетке согласно теории внутрикристаллического поля. По оси ординат — энергия. По оси абсцисс: слева — исходя из приближения слабого внутрикристаллического поля, справа — исходя из приближения сильного внутрикристаллического поля. [По Шлаферу и Глайману (Einführung in die Ligandenfeldtheorie, Akademische Verlaganstalt, Frankfurt, 1967).]

рами Ракá» В и С, которые описывают расстояния между S-, P-, ... терминами в свободном атоме. Количественное обсуждение этого примера находим в книге, цитируемой в подписи под рис. 23.

Мы ограничились здесь качественным объяснением расщепления атомных уровней в кристалле, используя соображения симметрии.