

Расчет Dq и D по известными частотам переходов в октаэдрических комплексах d-элементов

Полосы в спектре	Уравнения
<b>Ионы, имеющие основное состояние «Т»</b>	
$\nu_1, \nu_2, \nu_3$	$Dq = (\nu_2 - \nu_1)/10$
	$B = (\nu_2 + \nu_3 - 3\nu_1)/15$
$\nu_1, \nu_2$	$Dq = (\nu_2 - \nu_1)/10$
	$B = \nu_1(\nu_2 - 2\nu_1)/(12\nu_2 - 27\nu_1)$
$\nu_1, \nu_3$	$Dq = [(5\nu_3^2 - (\nu_3 - 2\nu_1)^2)^{1/2} - 2(\nu_3 - 2\nu_1)]/40$
	$B = (\nu_3 - 2\nu_1 + 10Dq)/15$
$\nu_2, \nu_3$	$Dq = [(85\nu_3^2 - 4(\nu_3 - 2\nu_2)^2)^{1/2} - 9(\nu_3 - 2\nu_2)]/340$
	$B = (\nu_3 - 2\nu_2 + 30Dq)/15$
<b>Ионы, имеющие основное состояние «А»</b>	
$\nu_1, \nu_2, \nu_3$	$Dq = \nu_1/10$
	$B = (\nu_2 + \nu_3 - 3\nu_1)/15$
$\nu_1, \nu_2$	$Dq = \nu_1/10$
	$B = (\nu_2 - 2\nu_1)(\nu_2 - \nu_1)/(15\nu_2 - 27\nu_1)$
$\nu_1, \nu_3$	$Dq = \nu_1/10$
	$B = (\nu_3 - 2\nu_1)(\nu_3 - \nu_1)/(15\nu_3 - 27\nu_1)$
$\nu_2, \nu_3$	$Dq = [(9\nu_2 + \nu_3) - (85(\nu_2 - \nu_3)^2 - 4(\nu_2 + \nu_3)^2)^{1/2}]/340$
	$B = (\nu_2 + \nu_3 - 30Dq)/15$