

第4章 配合物

4-1 配合物的基本概念

4-2 配合物的异构现象与立体结构

4-3 配合物的价键理论

4-4 配合物的晶体场理论



本章要求

- 1、掌握配合物的基本概念和配位键的本质；
- 2、掌握价键理论的主要论点，并能用此解释一些实例；
- 3、了解配合物的异构现象；
- 4、了解晶体场理论。

本章重点：配合物的命名；价键理论在配合物中的应用；

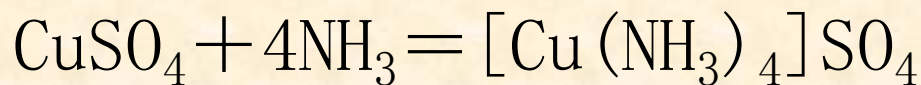
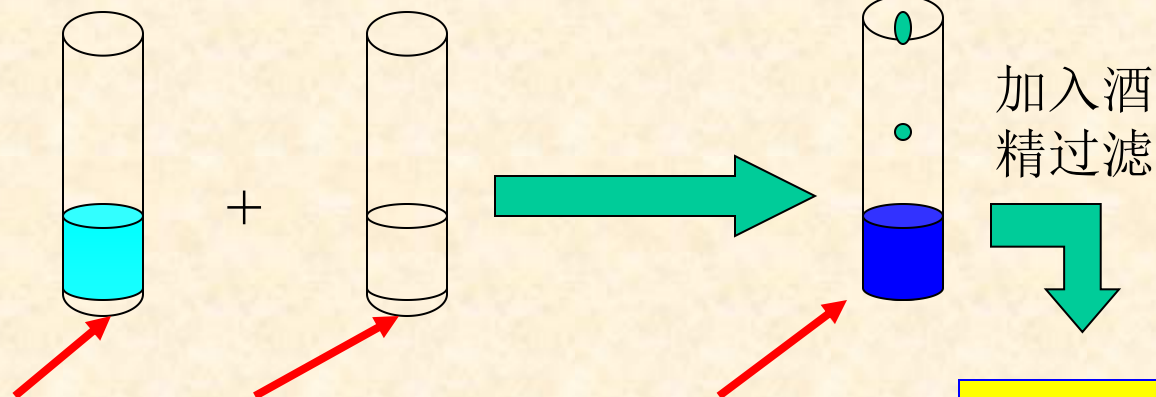
本章难点：价键理论，晶体场理论。

第四章 配合物

4---1 配合物的基本概念

一、配位化合物的定义

配合物的形成



深蓝色
晶体

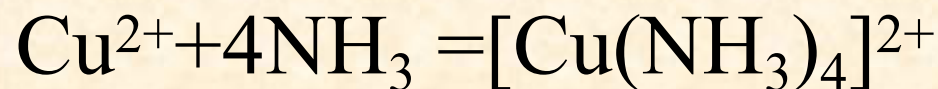
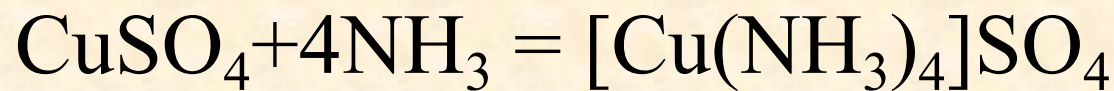
把纯净的深蓝色的硫酸四氨合铜晶体溶于水，分成三分，进行如理实验：



(1) 用pH试纸测定酸碱度：pH=7 说明没有明显 NH_3 ，

(2) 加入稀 NaOH 时无沉淀生成，说明无简单 Cu^{2+} 离子

(3) 加入 $\text{BaCl}_2 + \text{HNO}_3$ 溶液有沉淀生成，示有 SO_4^{2-} 离子



由中心离子（或原子）和配位体以配位键结合而成的稳定的、具有一定特性的离子称为**配离子**。

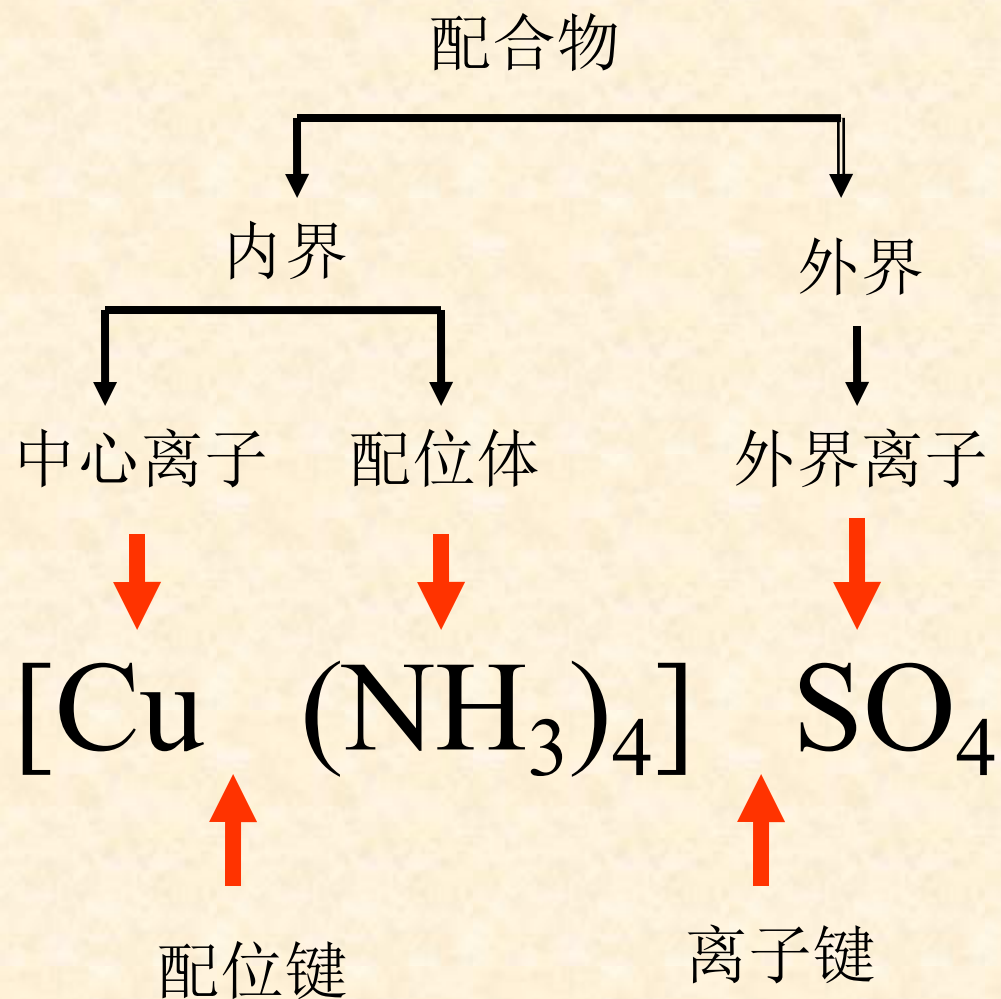
一个离子(或原子)和几个中性分子或其它种离子以配位键结合起来，生成具有一定稳定性的在溶液中仅部分解离或基本不解离的化学质点，这种化学质点叫做配位单元。凡含有配位单元的化合物叫做配位化合物(或配位物)。如：

$[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ 、 $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$ 为配离子；

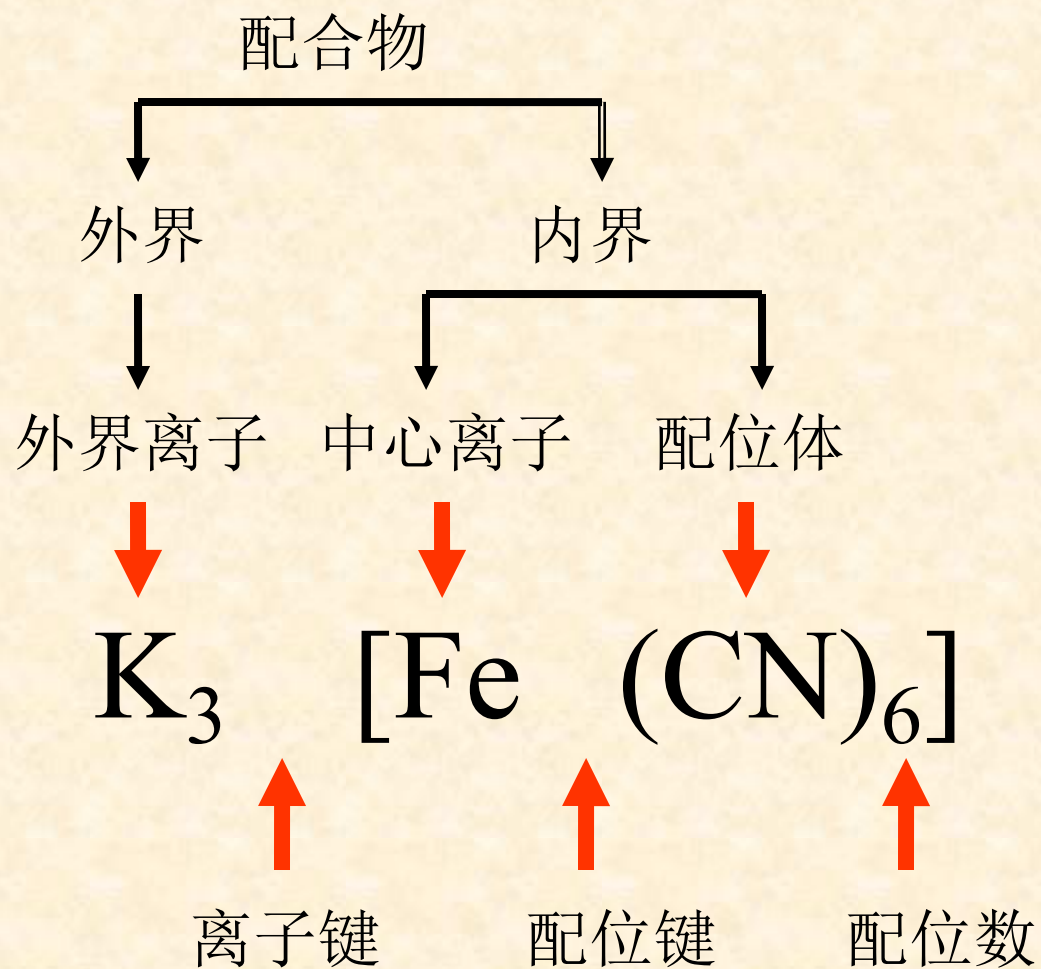
$[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]\text{SO}_4$ 、 $\text{K}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ 为配合物。

二、配合物的组成:

配合物一般分为 **内界和外界** 两大部分。内界是配合物的特征部分（即配位单元），它是由中心离子（或原子）和配位体组成的，它们之间靠配位键结合，在配合物的化学式中，常把内界写在方括号[]以内。除内界以外的其它离子称为外界。内界与外界之间以离子键相结合。仅有内界无外界的配合物属于配合分子。如：

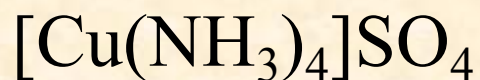


配离子
(配分子) { 形成体 — 中心离子或原子
 配位体 — 中性分子或阴离子



1、中心离子（原子）

中心离子（或原子）又称为配合物的形成体。它是配合物的核心部分，其特征是：具有空的价电子原子轨道，能接受孤对电子，与配位体形成配位键。



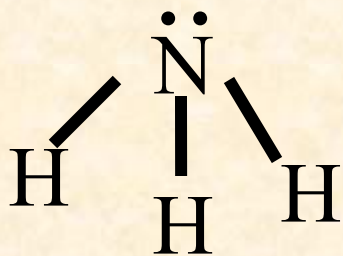
中心离子（或原子）一般都是带正电荷的正离子，多为过渡金属离子，如：



但也有一些是中性原子，甚至还有少数是带负电荷的离子，如 $\text{Ni}(\text{CO})_4$ 和 $\text{Fe}(\text{CO})_5$ 中的Ni原子和Fe原子； $\text{I}_5^-([\text{I}(\text{I}_2)_2]^-)$ 中的 I^- 离子， $\text{S}_9^{2-}([\text{S}\cdot\text{S}_8]^{2-})$ 中的 S^{2-} 离子等。

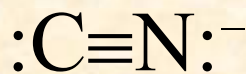
2、配位体

配离子（或配位分子）中，位于中心离子（或原子）周围，与中心离子（或原子）以配位键结合的分子或负离子称为**配位体**。配位体的特征是能提供孤对电子。配位体中，直接与中心离子（或原子）结合的原子称为**配位原子**。配位原子均含有未键合的孤对电子，它是电子对的直接供给者。如： $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]\text{SO}_4$

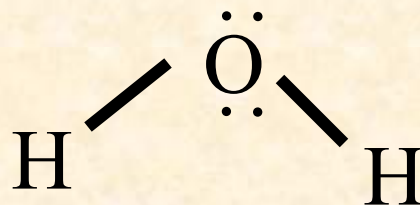


配位原子

N

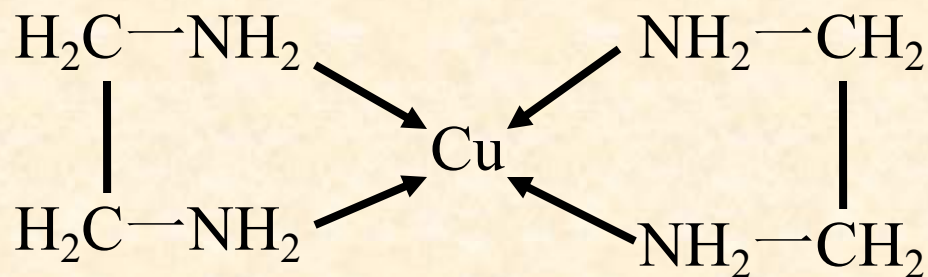


C

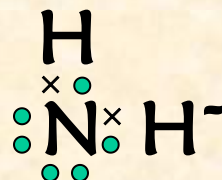
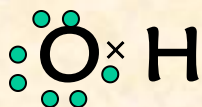


O

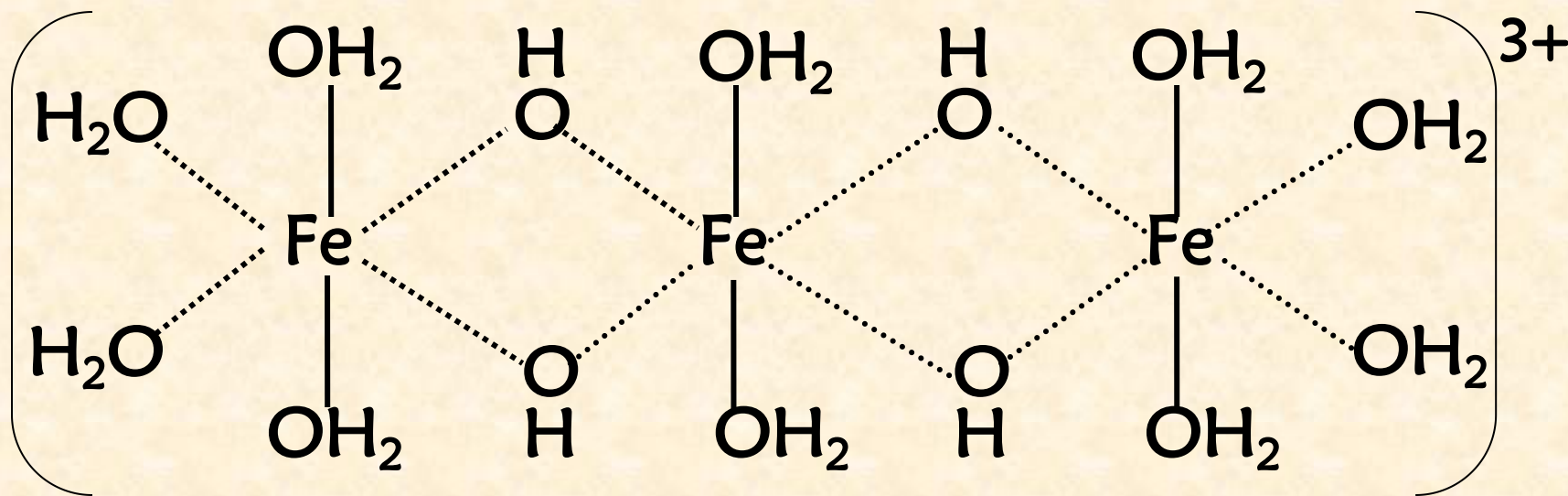
如果在配位体中只含有一个配位原子，如 X^- 、 NH_3 、 CN^- 等，则称为**单基配位体或单齿配位体**；含有两个或两个以上的配位原子，同时与一个中心离子结合的配位体，统称为**多基配位体或多齿配位体**，如乙二胺（ $\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{NH}_2$ ）。多基配位体与中心离子能形成具有环状结构的配合物，称为**螯合物**，因此这种多基配位体又称为螯合剂。如：



配位原子如果具有不只一对孤对电子时，也可以同时键合两个中心原子生成双核配合物，如下列配体：



如铁的水合离子(在偏碱性的条件下)：



联结两个中心原子的配体称为桥联配体或桥联基团，简称桥基。如上面的OH，含有两个或两个以上中心原子的配合物，称为多核配合物。

3、配位数

在配离子（或配合分子）中，直接与中心离子（或原子）结合的配位原子数目称为配位数，如：

$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$ 中的2，对于只含有单基配位体的配离子来说，其配位数就等于配位体的总数，如： $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$ 。对于含有多基配位体的配离子来说，配位数则等于各配位原子数与其配位体数的乘积之和，如： $[\text{Cu}(\text{en})_2]^{2+}$ 中，en为双基配位体，故 Cu^{2+} 离子的配位数为 $2 \times 2 = 4$ ；

$[\text{Co}(\text{en})_2\text{Cl}_2]^+$ 中 Co^{3+} 的离子的配位数为 $(2 \times 2) + (2 \times 1) = 6$ 。所以，含有多基配位体的配离子，其中心离子的配位数并不等于其配位体数，应根据所有配位体中的配位原子总数来计算。

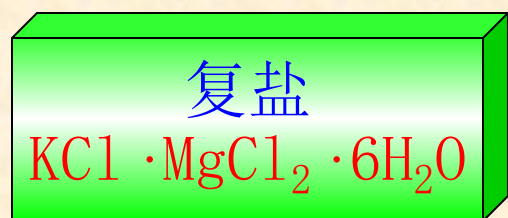
配位数的多少，决定于中心离子和配位体的电荷、体积、电子层结构等性质，也和配合物形成时的浓度、温度等条件有关。

一般来说，中心离子的电荷数越高，吸引配位体的能力越强，因此配位数就越高，如 Cu^{2+} 为4，而 Cu^{+} 的配位数为2。

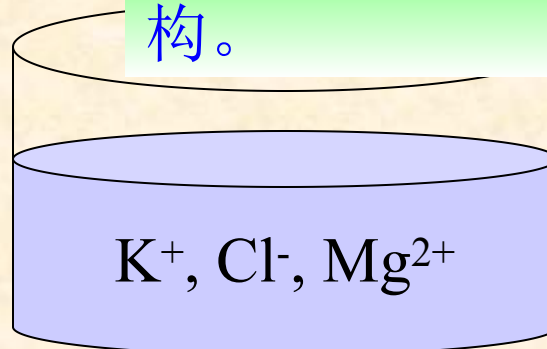
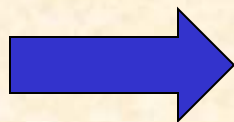
中心离子的半径越大，则其周围空间可容纳的配位体就越多，即配位数就越高。如 Al^{3+} 与 F^{-} 形成配位数为6的 $[\text{AlF}_6]^{3-}$ ，而 B^{3+} 与 F^{-} 只形成 $[\text{BF}_4]^{-}$ 。

增加配位体的浓度，有利于形成高配位数的配合物，而温度升高，则不利于配位体与中心离子结合，常使配位数降低。

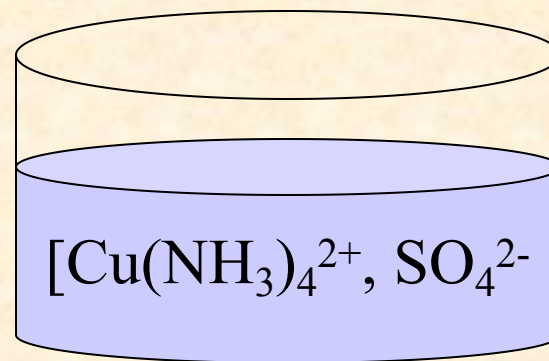
三、复盐与配合物的区别



溶于水



溶于水



固态都具有固定的组成和晶体结构。

溶液中电解质全部离子

配合物在溶液中存在复杂基团

配合物

电中性配合物——如 $\text{Fe}(\text{CO})_5$ 、 $\text{Co}(\text{NH}_3)_3\text{Cl}_3$

配离子—— $\text{Cu}(\text{NH}_3)_4^{2+}$ 、 $\text{Ag}(\text{CN})_2^-$

配酸 $\text{H}_2[\text{PtCl}_6]$ 、配碱 $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4](\text{OH})_2$ 、配盐 $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]\text{SO}_4$ （这些都可电离出配离子）

四、 配位化合物的命名

- 1、如果配合物的外界为一简单离子的酸根（如 I^- ），便称“某化某”（如碘化某）；如果酸根为一复杂负离子（如 SO_4^{2-} ），则称“某酸某”（如硫酸某）；如果外界为氢离子，则称“某酸”。
- 2、配离子的命名顺序是：配位体--“合”--中心离子。配位体的数目用一、二、三、....等数字标明，中心离子的氧化数用括号内的罗马数字表示出。如 $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]\text{Cl}$,命名为氯化二氨合银(I)。
- 3、如果有多种配位体，则先命酸根负离子，再命中性分子，先无机配位体后有机配位体，先简单后复杂。但书写次序正好相反。如 $[\text{Co}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2]\text{Cl}$,命名为：氯化二氯二氨合钴(III)。

配离子: 配位体--“合”--中心离子

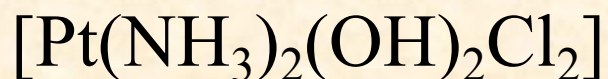
如:



三氯化六氨合钴(III)



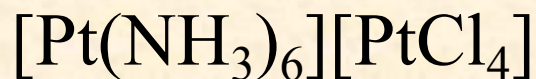
六氰合铁(III)配离子



二氯二羟基二氨合铂(IV)



二水溴化二溴四水合铬(III)



四氯合铂(II)酸六氨合铂(II)

4--2 配合物的异构现象与立体结构

1、结构异构：

原子间连接方式不同引起的异构现象(键合异构，电离异构，水合异构，配位异构，配位位置异构配位体异构)

(1)键合异构

$[\text{Co}(\text{NO}_2)(\text{NH}_3)_5]\text{Cl}_2$ 硝基 黄褐色 酸中稳定

$[\text{Co}(\text{ONO})(\text{NH}_3)_5]\text{Cl}_2$ 亚硝酸根 红褐色 酸中不稳定

(2) 电离异构

$[\text{Co}(\text{SO}_4)(\text{NH}_3)_5]\text{Br}$ $[\text{Co Br}(\text{NH}_3)_5] (\text{SO}_4)$

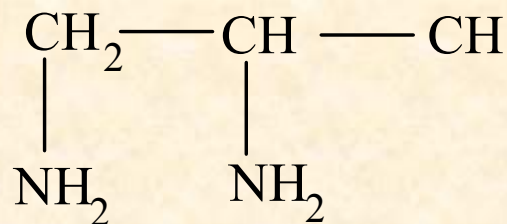
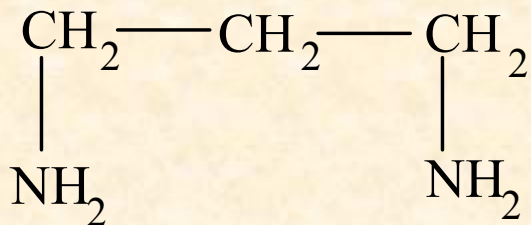
(3) 水合异构 $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{Cl}_3$ 紫色

$[\text{CrCl}(\text{H}_2\text{O})_5]\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ 亮绿色

$[\text{CrCl}_2(\text{H}_2\text{O})_4]\text{Cl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ 暗绿色

(4) 配位异构 $[\text{Co}(\text{en})_3][\text{Cr}(\text{ox})_3]$ $[\text{Cr}(\text{en})_3][\text{Co}(\text{ox})_3]$

(5) 配位体异构



4--3、价键理论

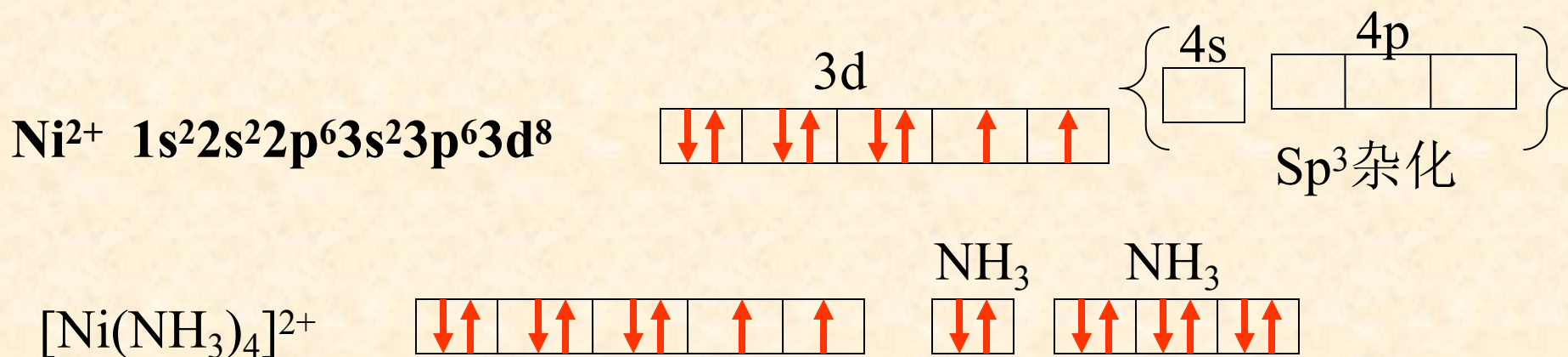
价键理论的基本要点：

- 1、配合物中，中心离子M（或原子）与配位体L之间是通过配位键 $L \rightarrow M$ 结合的，这种键的本质为共价性质。因此，配离子形成的条件是：配位体含有孤对电子，中心离子（或原子）具有空的价电子轨道。

如 Ag^+ 与 NH_3 作用时， Ag^+ 离子有空的价电子轨道($4d^{10}$)， NH_3 可以提供孤对电子，因而可以形成配离子，即 $[NN_3 \rightarrow Ag \leftarrow NH_3]^+$

价电子轨道是指中心离子（或原子）中一些价电子占有的轨道以及能量相近的轨道，通常是指 $(n-1)d$ 、 ns 、 np 和 nd 。 Cr^{3+} ： $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3$ 。则部分 $3d$ 以及 $4s$ 、 $4p$ 为空的价电子轨道。

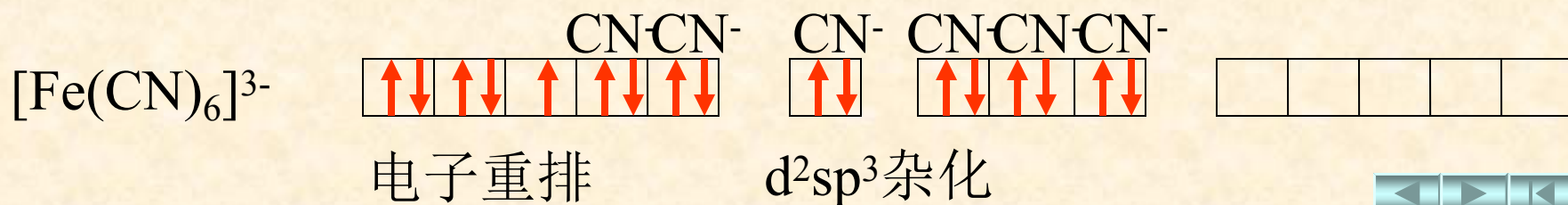
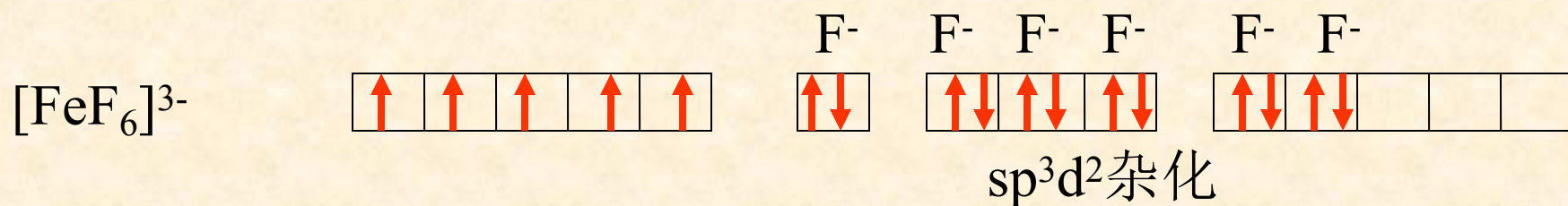
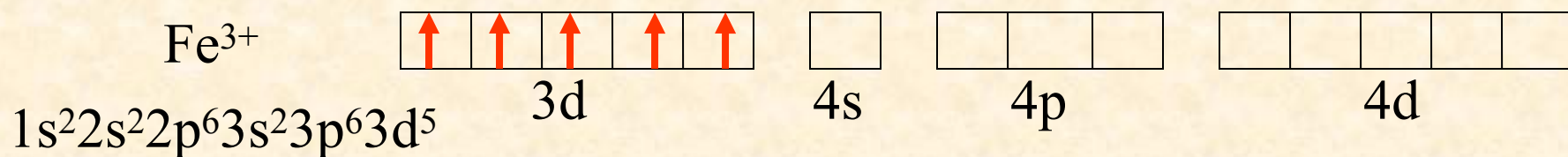
2、 为了增强成键能力，使形成的配离子或配合分子更加稳定，中心离子（或原子）所提供的空轨道必须首先进行杂化，形成数目相同、能量相等、具有一定方向性的新的杂化轨道，再分别与配位原子的孤对电子在一定方向上(一般是键轴方向)发生最大重叠而形成σ配键。如：



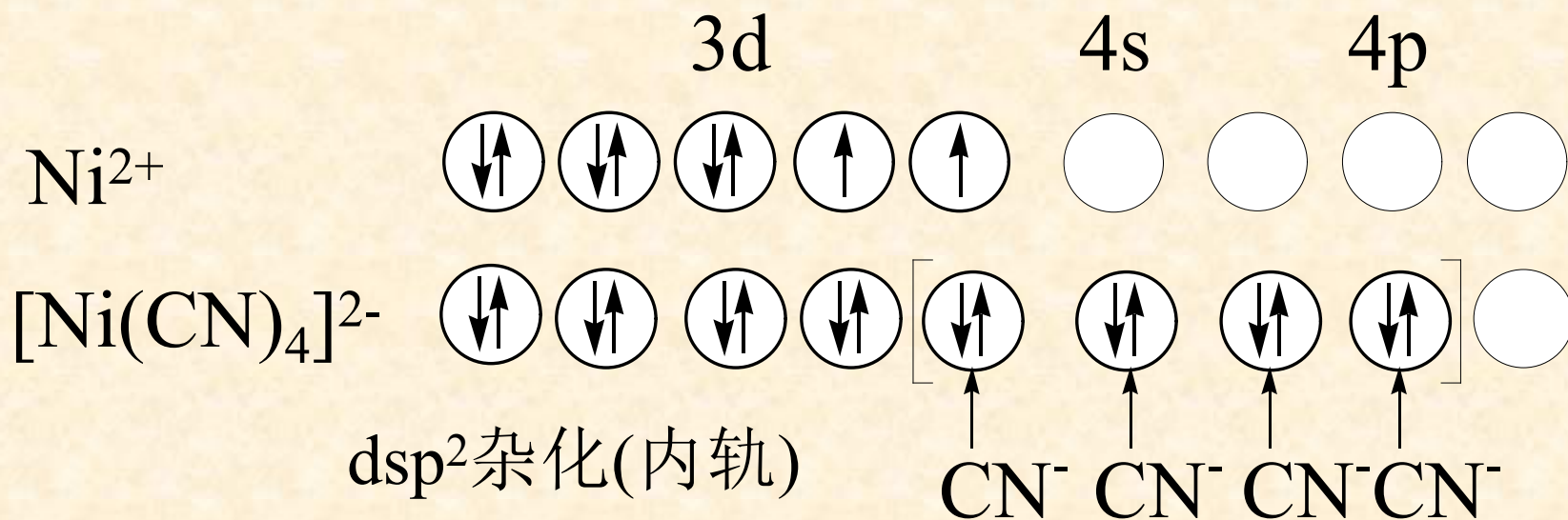
在形成配离子时，所用杂化轨道的类型就决定了中心离子的配位数、配位离子的空间构型以及它的稳定性。

3、 形成配位键时，如果中心离子（或原子）原有的电子层构型不变，提供的都是最外层轨道(ns, np, nd)，则形成的配合物称为外轨型配合物(高自旋型配合物)。

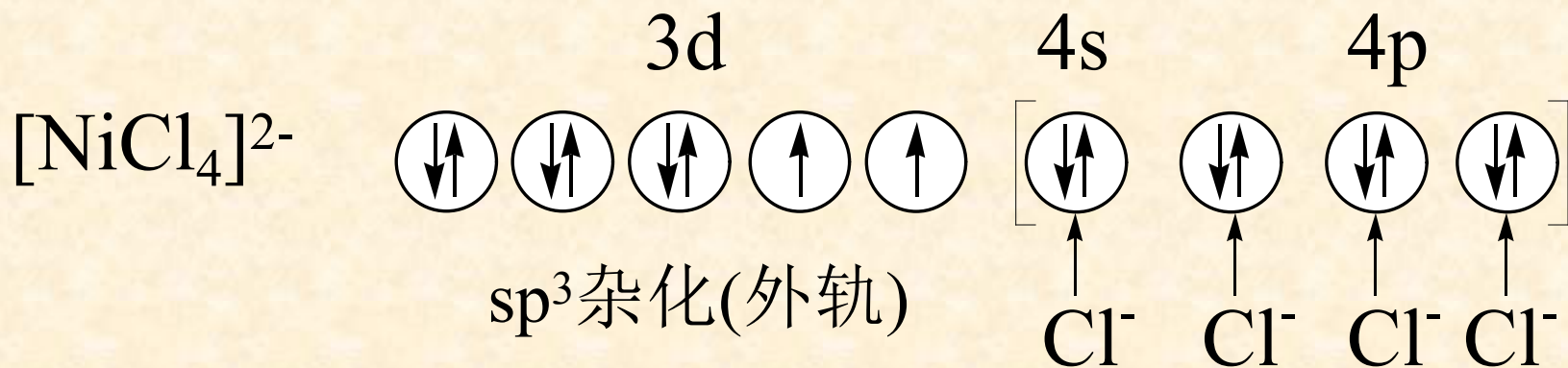
如果中心离子（或原子）改变了原有的电子层构型，让出了一部分次外层轨道(n-1)d参与杂化，则形成的配合物称为内轨型配合物(低自旋型配合物)。



$[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$ 的空间构型为平面正方形, $\mu=0$



$[\text{NiCl}_4]^{2-}$ 的空间构型为四面体, $\mu=2.83\text{B.M.}$



为什么有的中心离子与配位体形成外轨型配离子，有的则形成内轨型配离子？这主要是取决于中心离子的电子构型、离子电荷和配位体原子的电负性大小：

- A、 如果中心离子的d轨道已被充满(d^{10})如 Ag^+ 、 Zn^{2+} 、 Hg^{2+} ，它们就只能形成外轨型配离子，如 $[\text{Ag}(\text{CN})_2]^-$ ， $[\text{HgI}_4]^{2-}$ 等均是外轨型配离子。
- B、 如果中心离子d轨道的电子数小于5，如 $\text{Cr}^{3+}(3d^3)$ 、 $\text{V}^{3+}(3d^2)$ 、其次外层总有空轨道，它们只能形成内轨型配离子。
- C、 如中心离子d轨道数在5到10之间如 $\text{Fe}^{3+}(3d^5)$ 、 $\text{Co}^{3+}(3d^6)$ 、 $\text{Pt}^{2+}(5d^8)$ ，则它们既能形成外轨型亦可形成内轨型，这取决于配位体的电负性：

一般是：配位原子电负性较小的配位体，如： CN^- 、 CO 、 NO_2^- ，因为它们较易给出孤对电子，对中心离子 $(n-1)d$ 轨道电子的排斥作用较强，可导致中心离子的原来构型发生变化，从而倾向于形成内轨型配离子。

反之，如 F^- 、 H_2O 等配位原子电负性较大的配位体，倾向于形成外轨型配离子。配位原子电负性居中的配位体，如 NH_3 、 Cl^- 则两者都有可能形成，如 $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ 是外轨型，而 $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ 则是内轨型。

在外轨型配合物中，中心离子与配位体的结合力可认为基本上是静电引力，接近离子键，故又称为离子型配合物，其特点是键能较小，稳定性较差，在水溶液中较容易离解，受热易分解。

内轨型配合物则是 $(n-1)d$ 参与杂化成键，比外轨型的 nd 轨道能量低些，因此这类配合物的键能较大，较稳定，在水中不易离解，受热也不易分解，其中心离子与配位体之间的结合力接近共价键，故又称为共价型配合物。

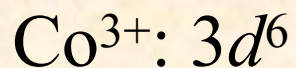
同一中心离子的内轨型配合物比相应的外轨型配合物稳定。如： $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-} > [\text{FeF}_6]^{3-}$ ， $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-} > [\text{Ni}(\text{NH}_3)_2]^{2+}$ 。

一种配合物是内轨型还是外轨型，可以通过测定其磁矩来判断，因为形成配合物后，中心离子内层轨道中未成对的电子数可能发生变化，因此磁性亦会随之发生变化：

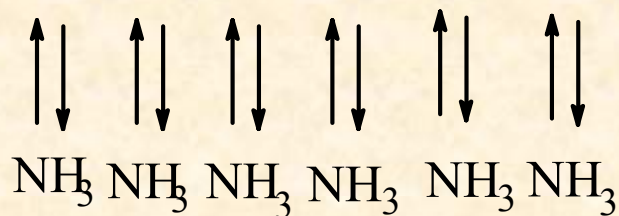
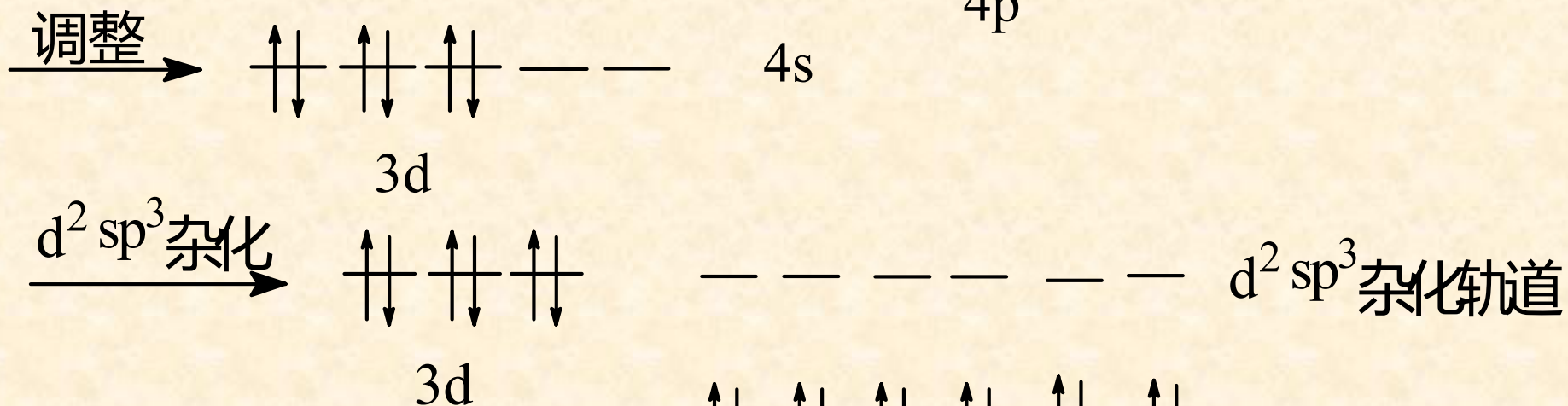
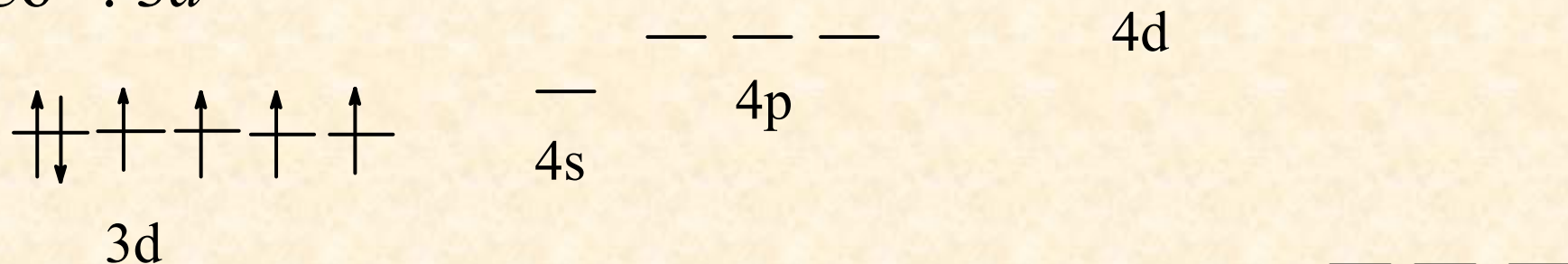
$$\mu = \sqrt{n(n+2)}$$

N：未成对的电子数， μ ：磁矩(B.M)

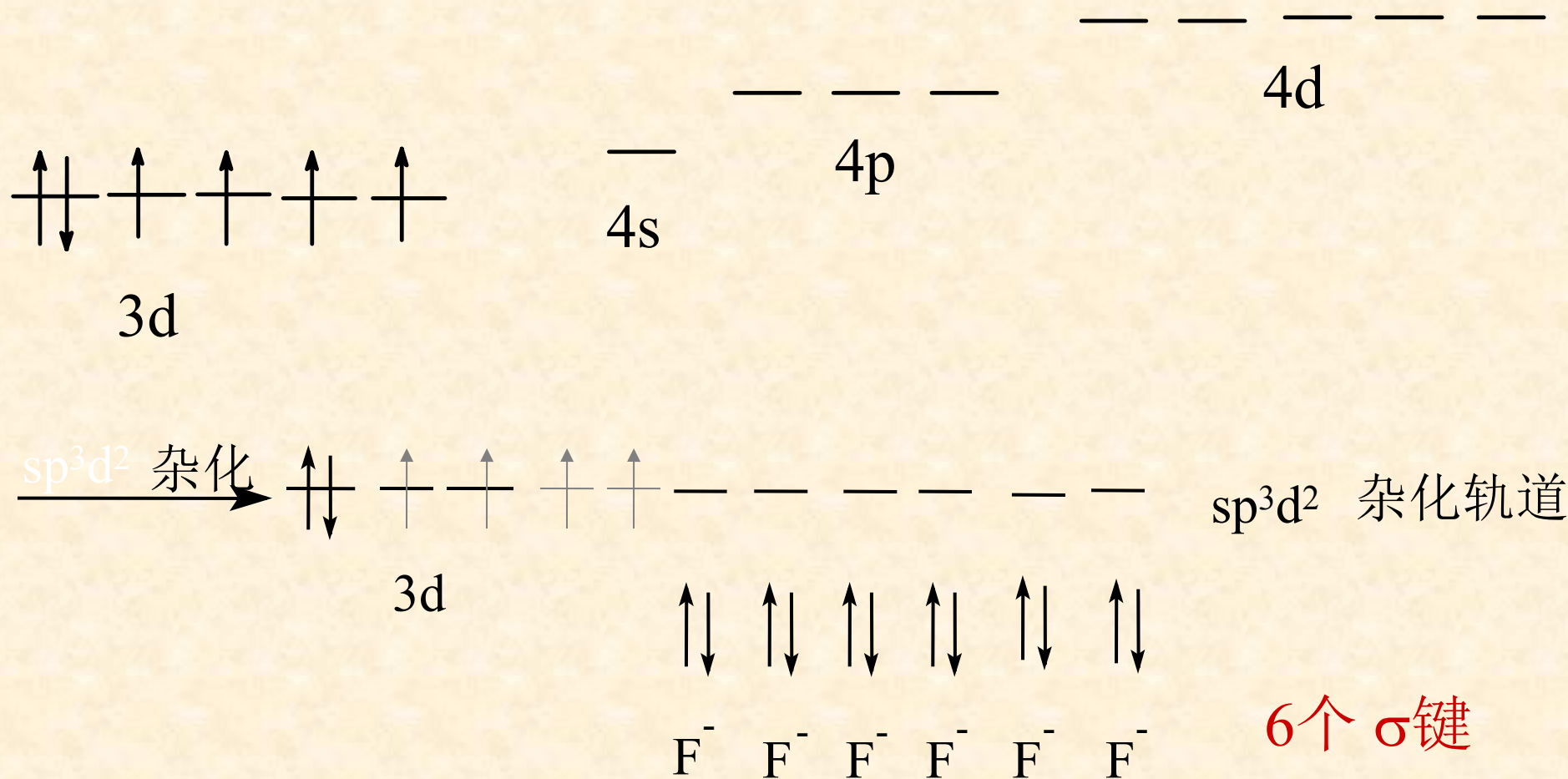
由未成对电子数来判别其杂化类型，从而确定配合物是外轨还是内轨型。但要注意这不是唯一的因素，还应考虑其它的因素，如键长、稳定性等。



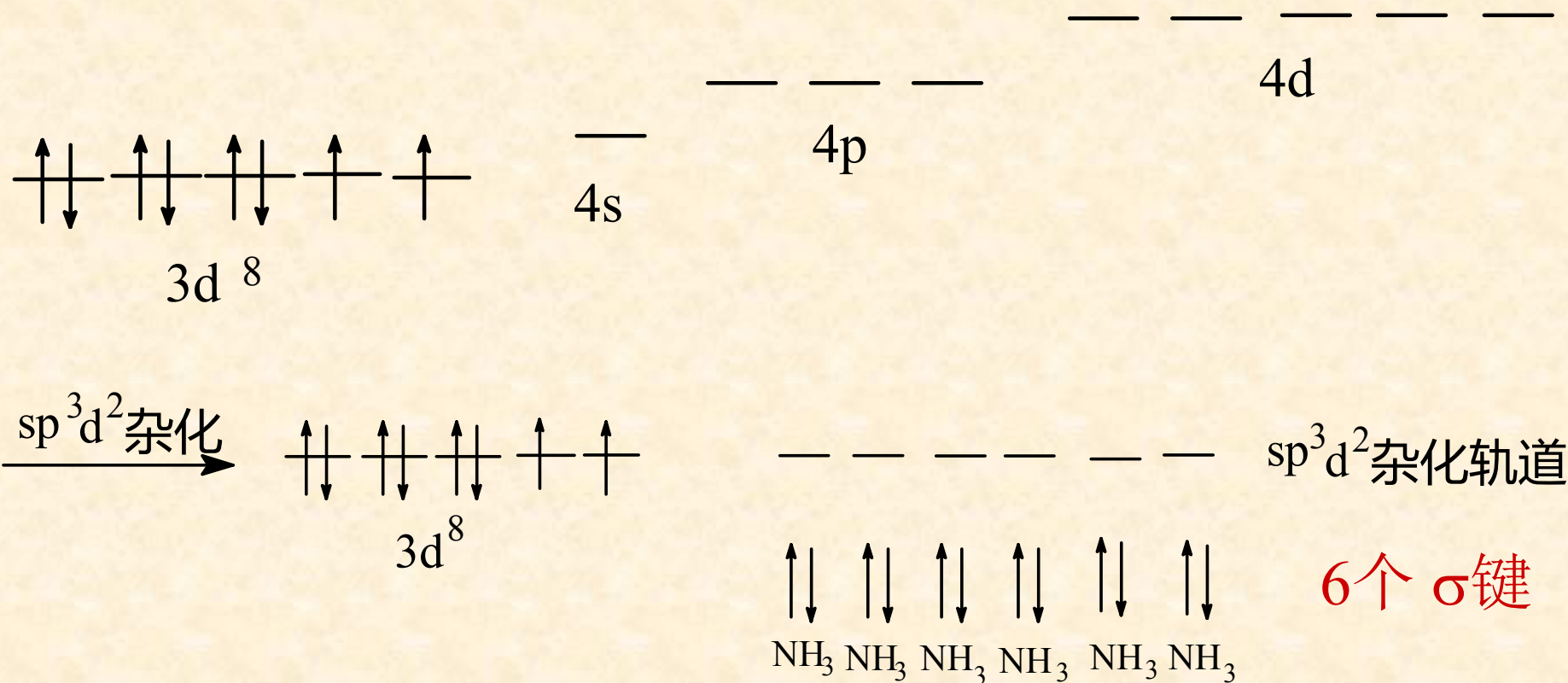
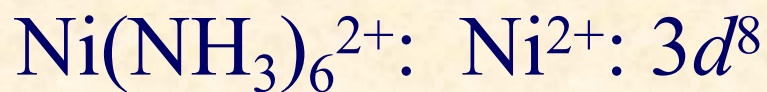
内轨型配合物，低自旋 $\mu = 0$



6个 σ 键



外轨型配合物，高自旋 $\mu = 4.90\text{B.M.}$ 正八面体



外轨型配合物，高自旋 $\mu = 2.82 \text{ B.M.}$ 八面体 构型

配离子的空间构型

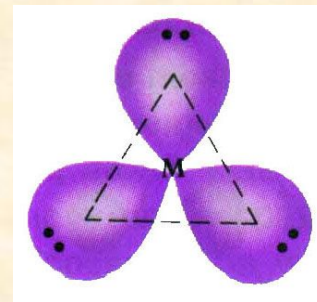
配离子的空间构型决定于中心离子提供的杂化轨道的类型，因为不同类型的杂化轨道具有不同的空间取向，杂化轨道的方向就决定 σ 配键取向，从而决定了配离子的空间构型。（如表所示）

杂化类型与空间结构

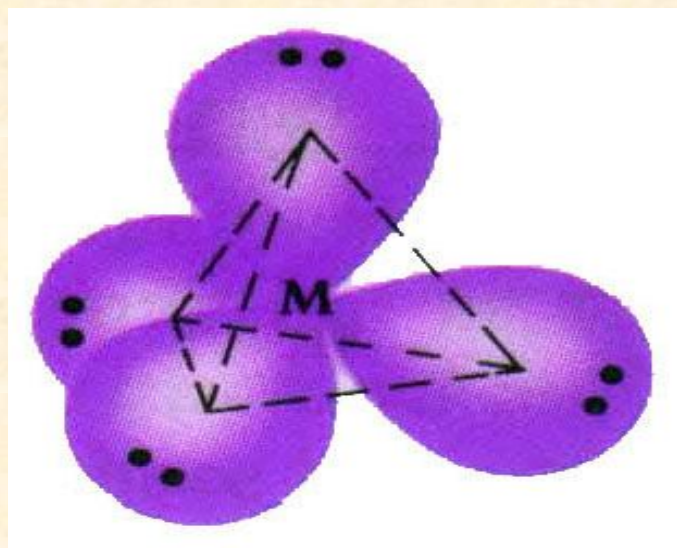
配位数	杂化类型	空间结构	实例
2	sp	直线型	$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_6]^+$
3	sp^2	平面三角	$[\text{AgCl}_3]^{2-}$
4	sp^3	四面体	$[\text{FeCl}_4]^-$
	dsp^2	平面四边形	$[\text{PtCl}_4]^{2-}$
5	dsp^3	三角双锥	$[\text{Fe}(\text{CO})_5]$
	d^2sp^2	四角锥	$[\text{SbF}_5]^{2-}$
6	d^2sp^3	正八面体	$[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$
	sp^3d^2		$[\text{FeF}_6]^{3-}$



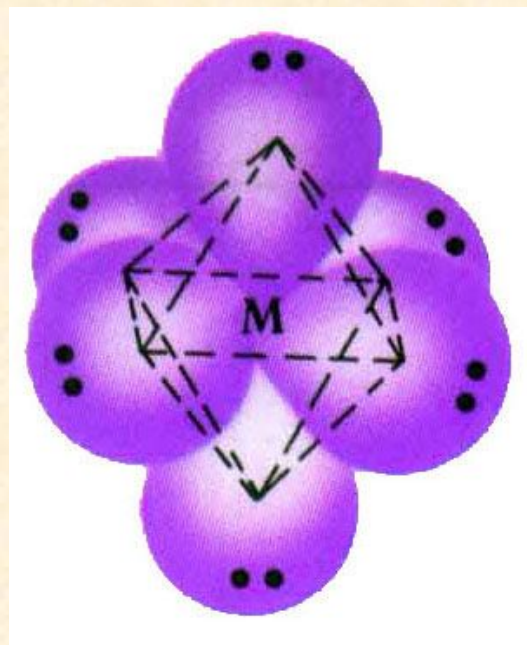
sp 杂化、直线型、 $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$



sp^2 杂化、平面三角型、 $[\text{CO}_3]^{2-}$



sp^3 杂化、四面体型、 $[\text{CrO}_4]^{2-}$



d^2sp^3 杂化、正八面体、 $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$

4--4 配合物的晶体场理论

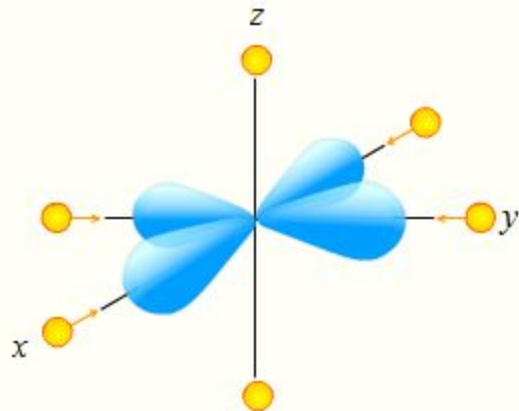
一、要点：配位体对中心离子的影响

- 1: 中心离子M与配位体L成键时，配体的静电场对中心离子的d轨道电子的不同排斥作用力，使d轨道能级发生了分裂
- 2: 过渡金属的中心离子的5个d轨道在假想的球形场(均匀电场)中能量是简并的，受到配位体负电场作用时，会发生d轨道的能级分裂。
- 3: 分裂类型与化合物的空间构型有关。
- 4: 晶体场相同，L不同，分裂程度也不同。

晶体场理论的应用:解释配合物的磁性，解释配合物的稳定性，解释配合物的颜色（吸收光谱），解释离子水合热变化规律等。

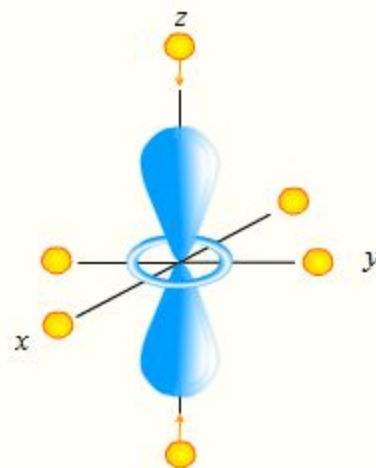
二、d轨道分裂情况

在八面体型的配合物中，6个配位体分别占据八面体的6个顶点，由此产生的静电场叫做八面体场。八面体场中中心原子d轨道与配体间的空间关系如下作用：



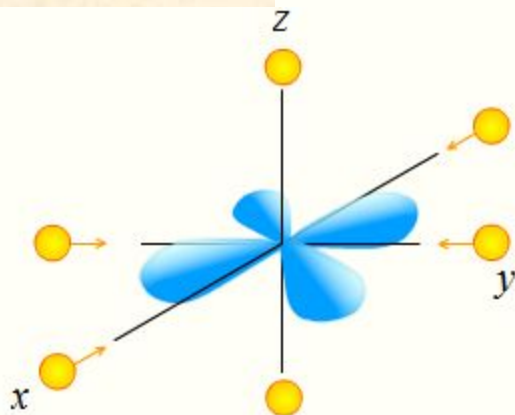
$d_{x^2-y^2}$

● —— 配体



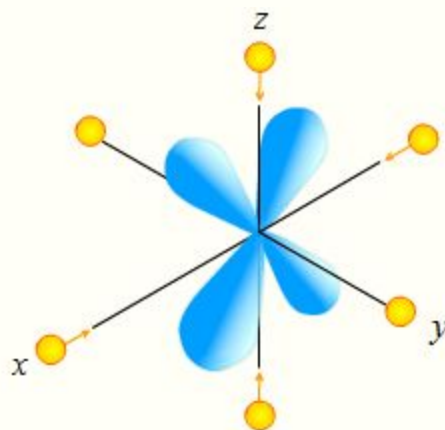
d_{z^2}

● —— 配体



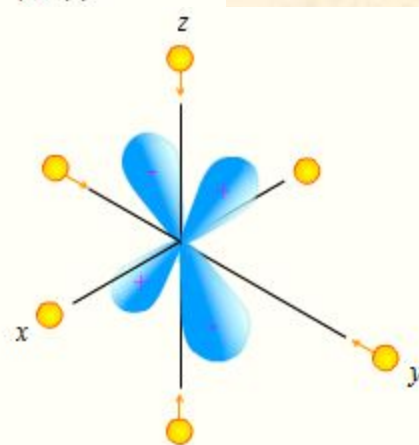
d_{xy}

● —— 配体



d_{xz}

● —— 配体



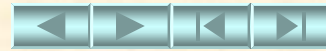
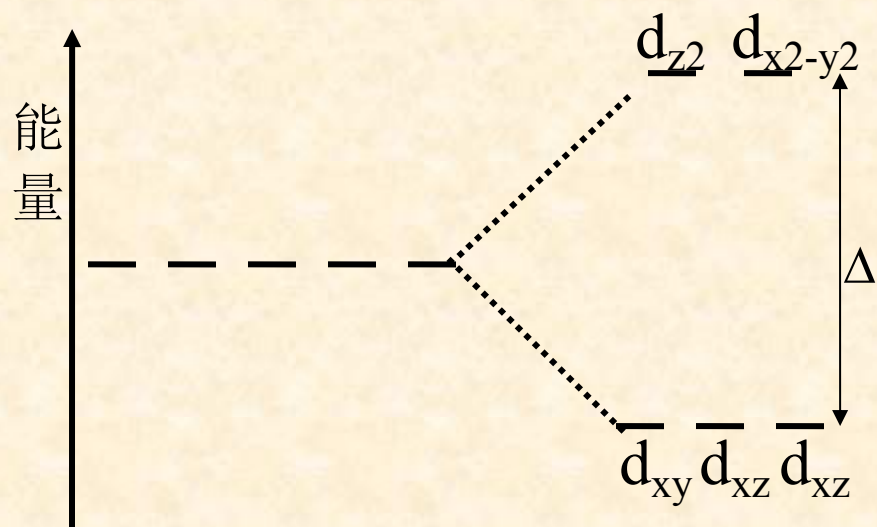
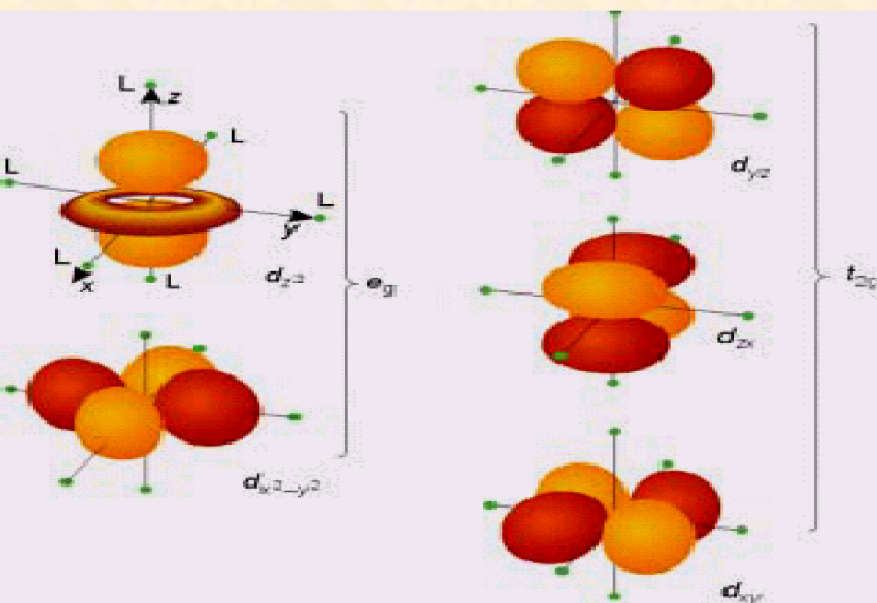
d_{yz}

● —— 配体

从上图可知，中心原子的 d_{z^2} 轨道和 $d_{x^2-y^2}$ 轨道的电子云图像的轴正好与配位体相碰，因此，这两个轨道会由于受到配体带负电的孤对电子的排斥而能量升高。而 d_{xy} 、 d_{yz} 和 d_{xz} 三个轨道的电子云长轴没有对准配体，是插在它们之间，受到配体孤对电子的负电的排斥力小很多，结果使原来简并的5个轨道按能量的高低分成两组：

d_{z^2} , $d_{x^2-y^2}$ 轨道能量升高较多 (e_g 或 d_r 轨道组)

d_{xy} , d_{yz} , d_{xz} 轨道能量升高较少 (t_{2g} 或 d_e 轨道组)



三、分裂能 (Δ)

d 轨道分裂后，最高**d**轨道的能量与最低**d**轨道的能量差，称为**分裂能 (Δ)**

Δ 单位: $/\text{cm}^{-1}$, J/mol , kJ/mol 。 $1\text{cm}^{-1} = 12.0\text{J}/\text{mol}$



Δ_o : (O: octahedral)八面体场**d**轨道的能级分裂能

$\Delta_o = 10 \text{ Dq}$, Δ_o 分为**10等份**，每份为**1Dq**.

八面体场中分裂能的计算:

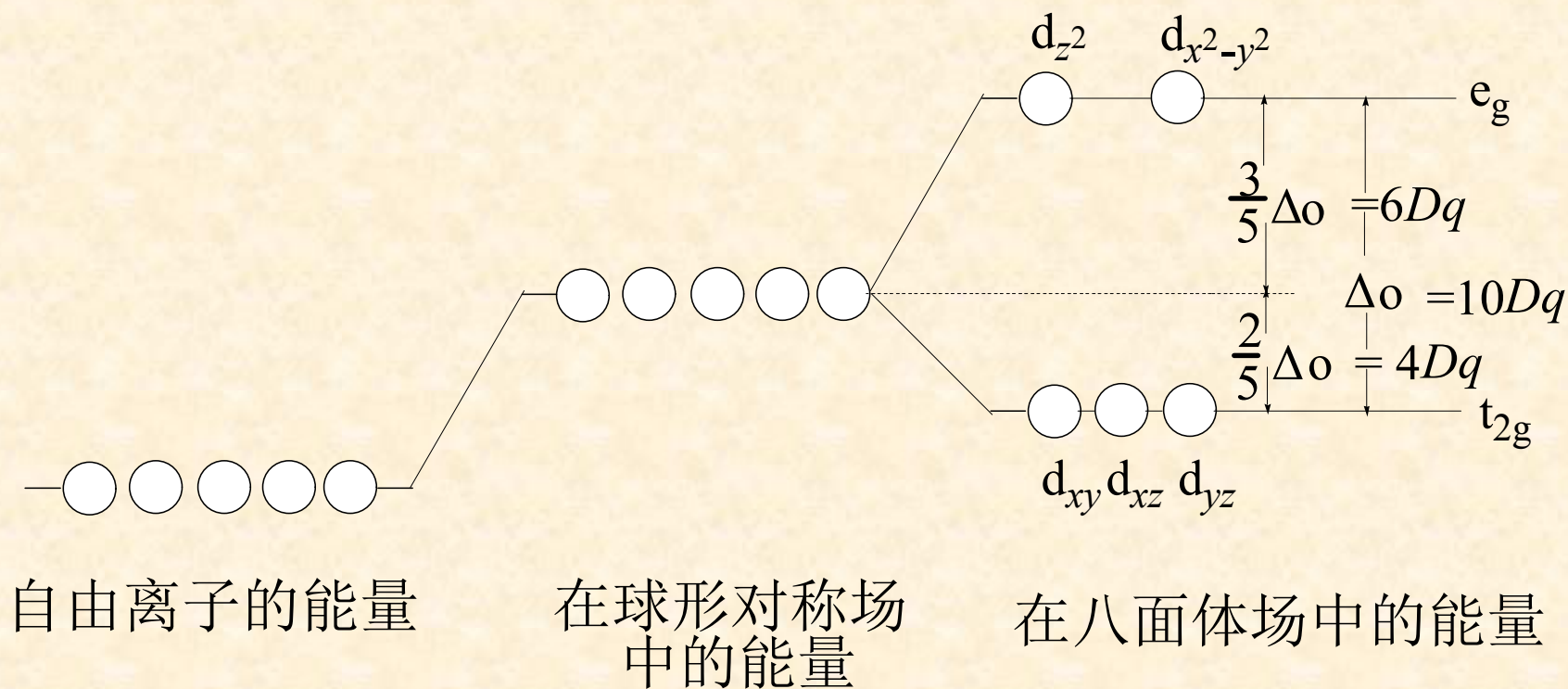
e_g 轨道 的能量为 $E e_g$, t_{2g} 轨道的能量为 $E t_{2g}$

$$E e_g - E t_{2g} = 10 \text{ Dq} = \Delta_o \quad (1)$$

$$2E e_g + 3E t_{2g} = 0 \quad (2)$$

解得: $E e_g = 6 \text{ Dq}$ $E t_{2g} = -4 \text{ Dq}$ (记住)

八面体场中d轨道能级分裂能:



四、影响分裂能 Δ 的因素

(1) 配体相同的条件下，中心离子的影响

(a) 同一元素随氧化态升高而增大 $\text{Fe}^{2+} < \text{Fe}^{3+}$

$[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+} \quad \Delta_o = 166 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, $[\text{Cr}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+} \quad \Delta_o = 208 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$

(b) 同族元素自上而下增大 例: $\text{Fe}^{2+} < \text{Ru}^{2+} < \text{Os}^{2+}$

(c) 中心离子 d 轨道的主量子数越大，分裂能越大，

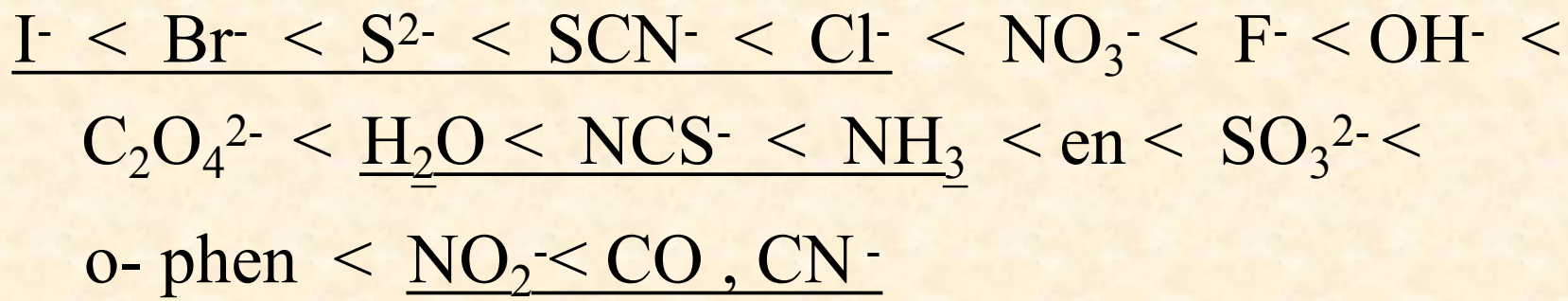
$\Delta_o(\text{第三过渡系}) > \Delta_o(\text{第二过渡系}) 20\% - 30\% > \Delta_o(\text{第一过渡系}) 40\% - 50\%$

$[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+} \quad \Delta_o = 274 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$

$[\text{Rh}(\text{NH}_3)_6]^{3+} \quad \Delta_o = 408 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$

$[\text{Ir}(\text{NH}_3)_6]^{3+} \quad \Delta_o = 490 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$

(2) 配体对 Δ 的影响(光谱化学序列) (记住常见的配体)



以配位原子分类:



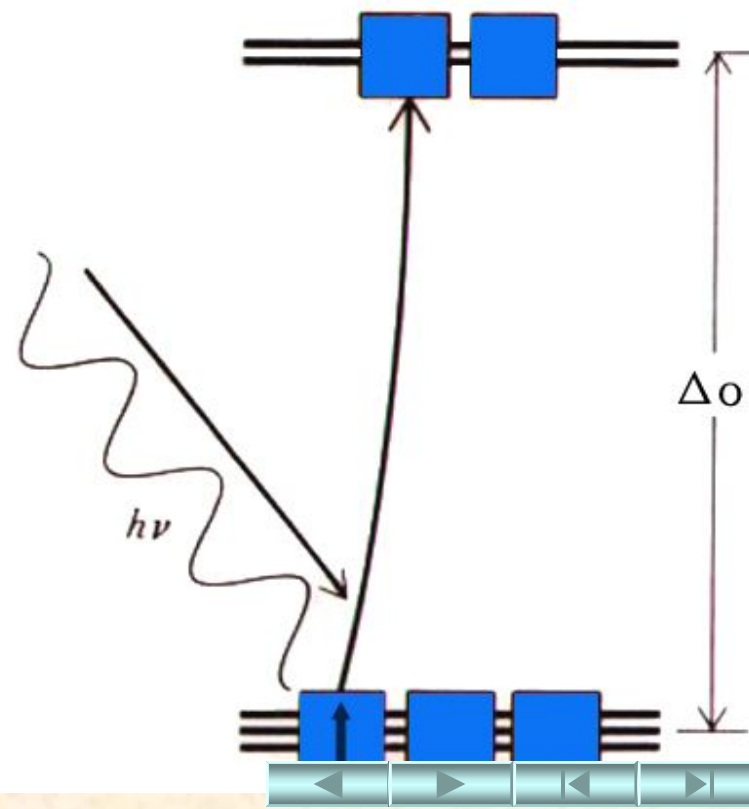
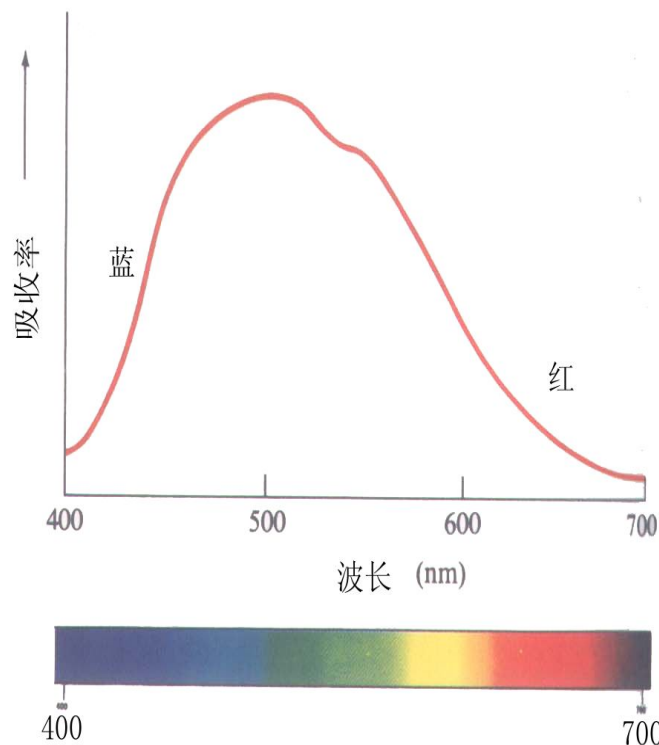
Δ 越大——强场 Δ 越小——弱场

H_2O 以前的称为弱场;

$\text{H}_2\text{O} \sim \text{NH}_3$ 之间的称为中间场;

NH_3 以后的称为强场

配合物离子的颜色与配合物的分裂能大小有关，即配合物离子所吸收光子的频率与分裂能大小有关。分裂能越大，吸收光子的能量越大，即频率越高，它的补色的频率就越低。而颜色的深浅与跃迁电子数目有关。



五、 d 轨道能级分裂后， d 电子在轨道上的排布遵循的原则

电子成对能(p)：电子在原子轨道成对时由于克服电子之间的电性排斥力所消耗的能量。

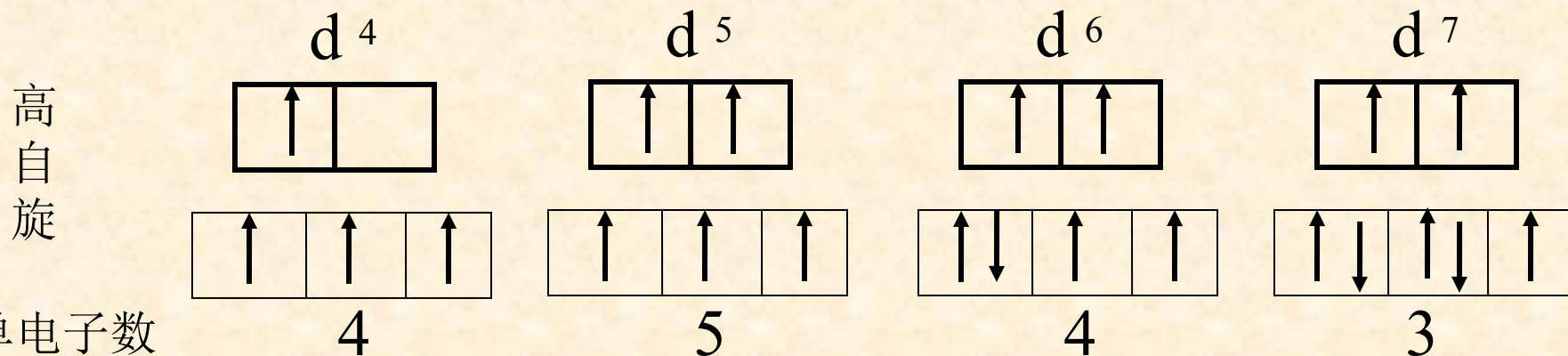
d 电子在轨道上的排布遵循的原则：

1、**能量最低原理**

2、电子成对能(p) > 分裂能(Δ)时，即(弱场)

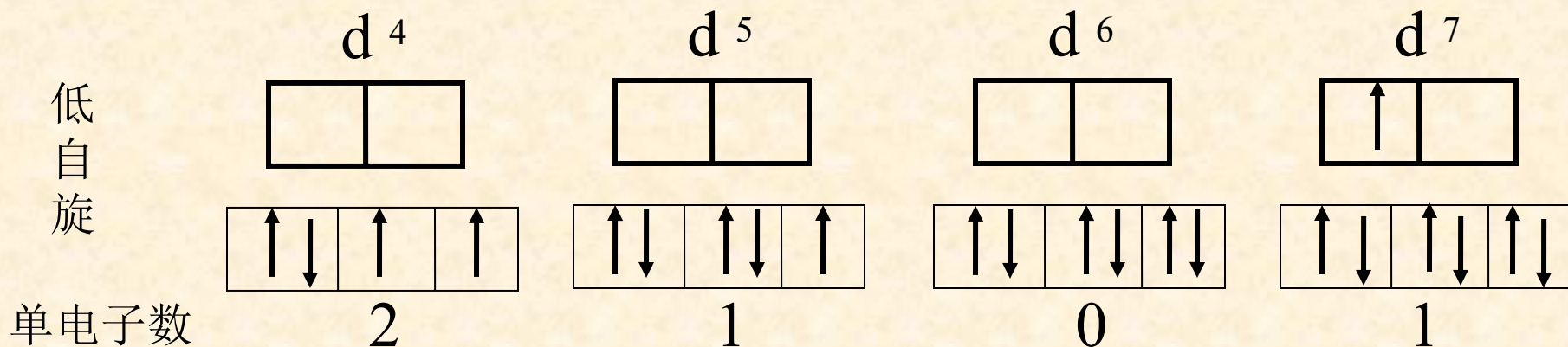
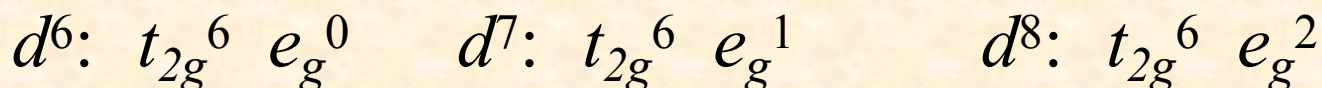
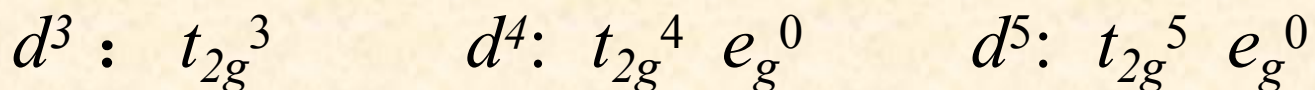
电子尽可能以自旋相同方式分占不同的轨道，

即弱场—高自旋排布方式(多未成对电子)—**洪特规则**



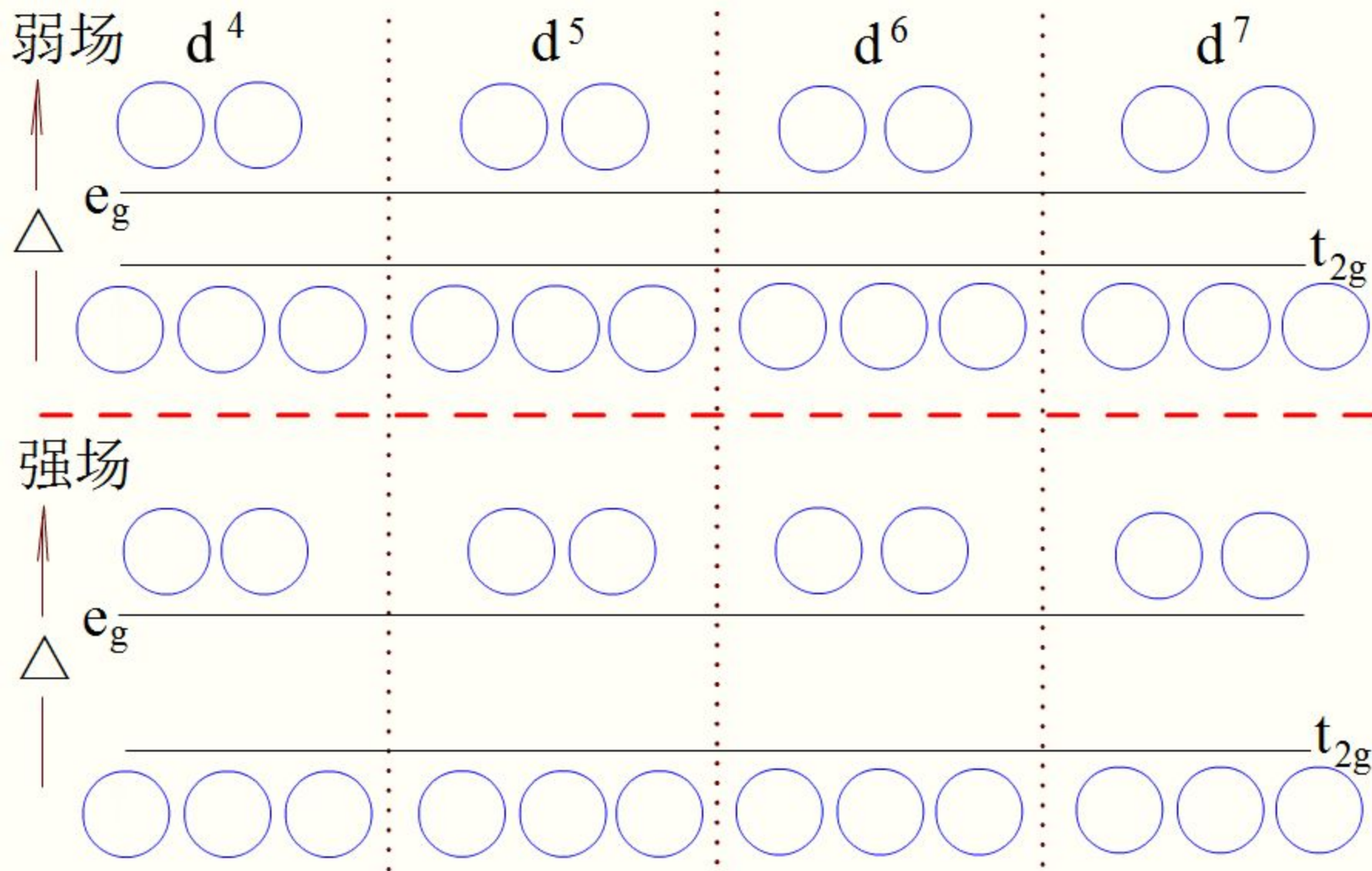
3、电子成对能(p) < 分裂能 (Δ) 时, (强场)

电子以成对形式排布,即强场——低自旋排布方式
(少未成对电子)

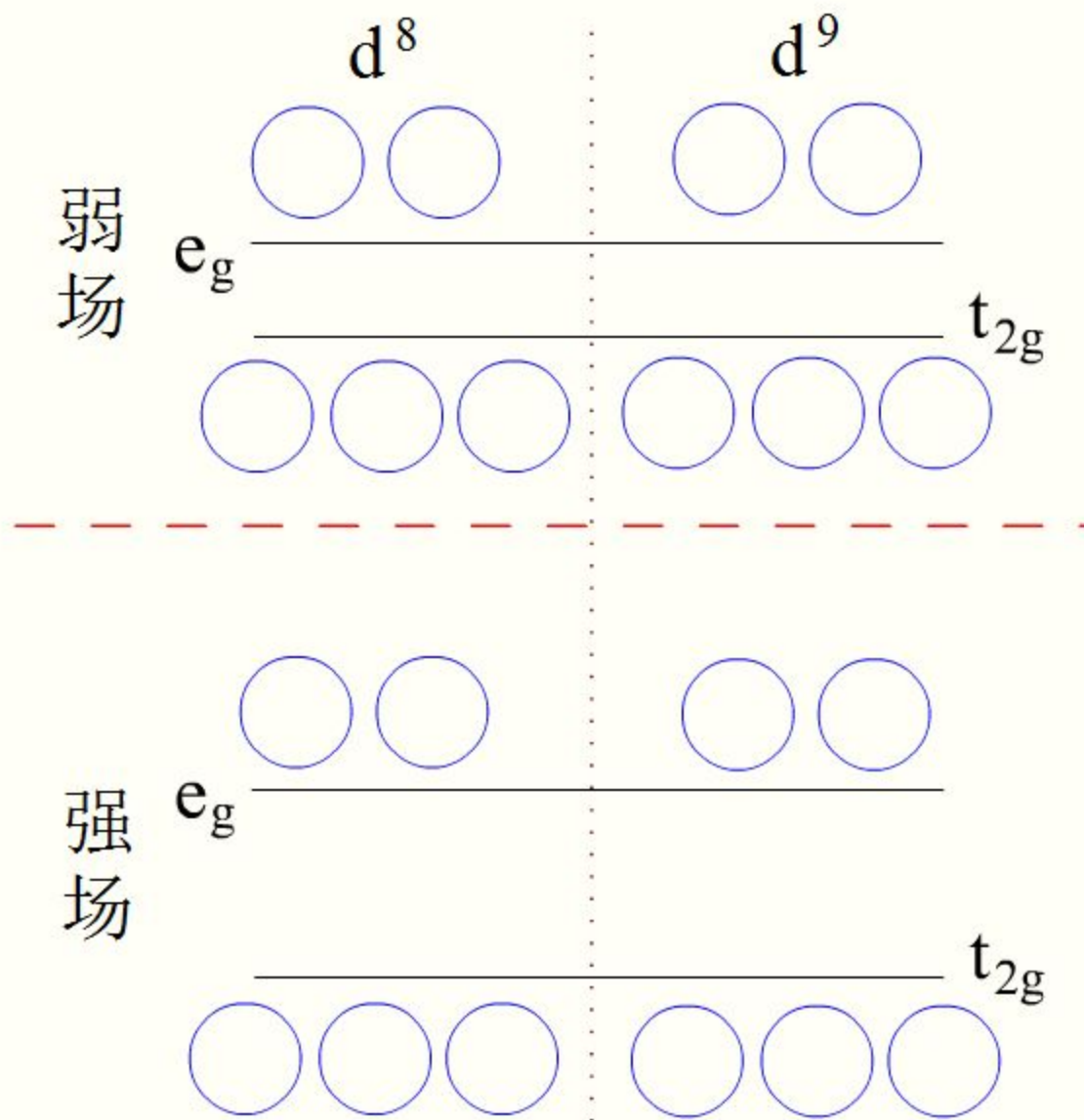


4、高自旋 — 配合物稳定性差。
低自旋 — 配合物稳定性增大。

八面体场中电子在 t_{2g} 和 e_g 轨道中的分布

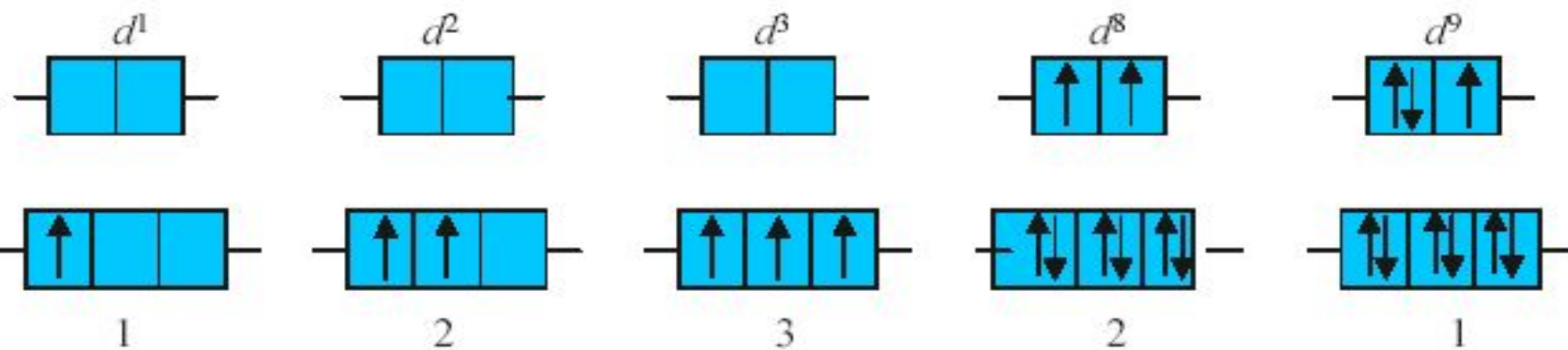


八面体场中电子在 t_{2g} 和 e_g 轨道中的分布

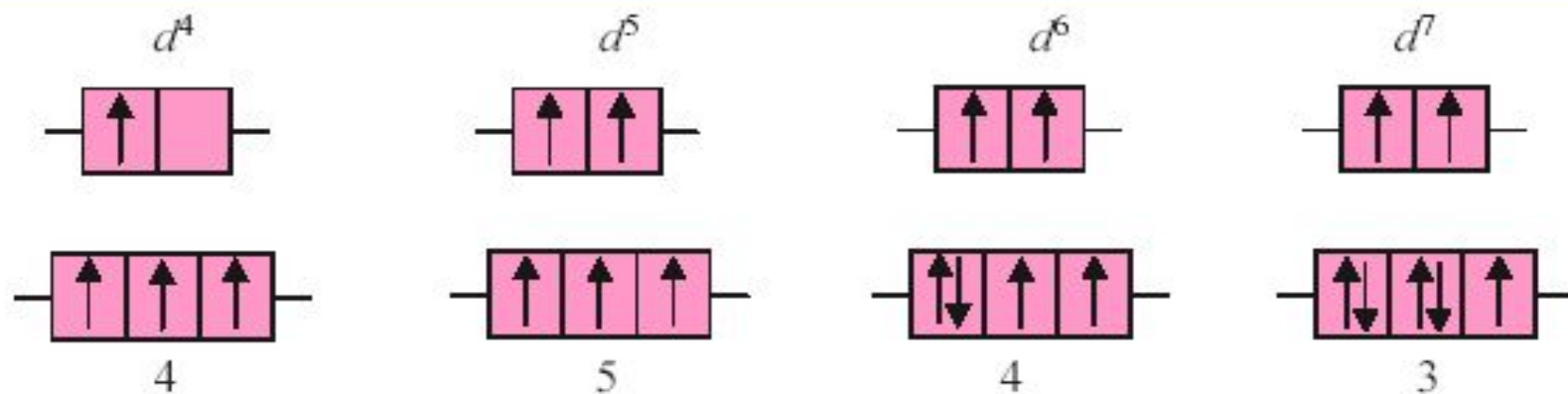


八面体场中电子在 t_{2g} 和 e_g 轨道中的分布

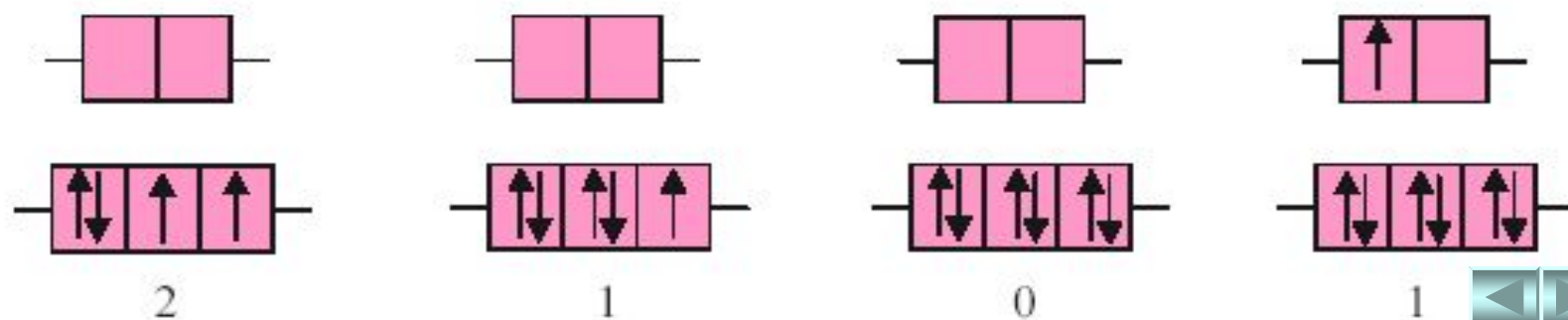
只有一种排列



高自旋



低自旋



六、晶体场稳定化能(CFSE, Crystal field stabilization energy)

在晶体场中， d 轨道发生分裂，电子排布采用高自旋或低自旋排列方式，体系能量比未分裂前能量的下降值称为晶体场稳定化能(CFSE)。

影响晶体场稳定化能的因素：

1、 Δ 大小

2、 d^1 , d^2 , d^3 , d^8 , d^9 , d^{10} :

强场和弱场电子排布相同 — CFSE是相同

$d^4 \sim d^7$: 强场和弱场电子排布不同 — CFSE不同

CFSE的计算:

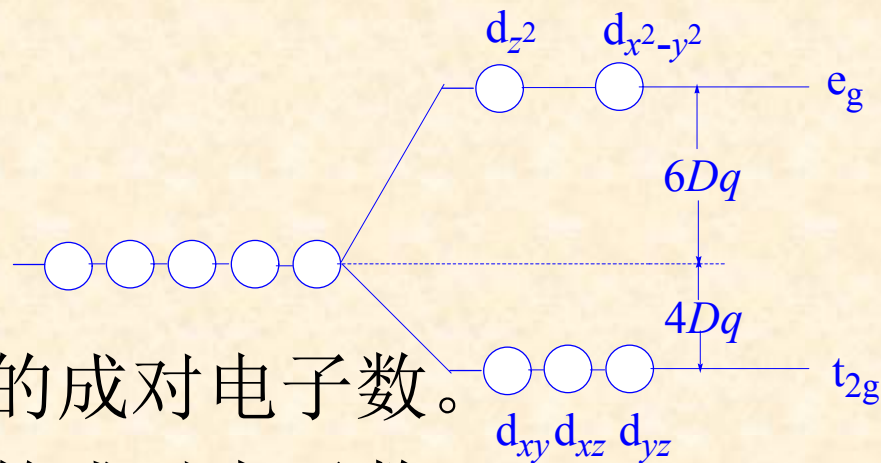
设 n_1 : t_{2g} 轨道中的电子数。

n_2 : e_g 轨道中的电子数。

m_1 : 八面体场中d轨道中的成对电子数。

m_2 : 球形体场中d轨道中的成对电子数。

则:



$$CFSE = n_1 E_{t_{2g}} + n_2 E_{e_g} + (m_1 - m_2)P$$

$$= n_1(-4Dq) + n_2(6Dq) + (m_1 - m_2)P$$

$$= (-4n_1 + 6n_2)Dq + (m_1 - m_2)P$$

$$CFSE = (-4 n_1 + 6 n_2)Dq + (m_1 - m_2)P$$

八面体场的 CFSE

d^n	弱 场				强 场			
	构型	电子对数		CFSE	构型	电子对数		CFSE
		m_1	m_2			m_1	m_2	
d^1	t_{2g}^1	0	0	$-4 Dq$	t_{2g}^1	0	0	$-4 Dq$
d^2	t_{2g}^2	0	0	$-8 Dq$	t_{2g}^2	0	0	$-8 Dq$
d^3	t_{2g}^3	0	0	$-12 Dq$	t_{2g}^3	0	0	$-12 Dq$
d^4	$t_{2g}^3 e_g^1$	0	0	$-6 Dq$	t_{2g}^4	1	0	$-6 Dq + P$
d^5	$t_{2g}^3 e_g^2$	0	0	$0 Dq$	t_{2g}^5	2	0	$-20 Dq + 2P$
d^6	$t_{2g}^4 e_g^2$	1	1	$-4 Dq$	t_{2g}^6	3	1	$-24 Dq + 2P$
d^7	$t_{2g}^5 e_g^2$	2	2	$-8 Dq$	$t_{2g}^6 e_g^1$	3	2	$-18 Dq + P$
d^8	$t_{2g}^6 e_g^2$	3	3	$-12 Dq$	$t_{2g}^6 e_g^2$	3	3	$-12 Dq$
d^9	$t_{2g}^6 e_g^3$	4	4	$-6 Dq$	$t_{2g}^6 e_g^3$	4	4	$-6 Dq$
d^{10}	$t_{2g}^6 e_g^4$	5	5	$0 Dq$	$t_{2g}^6 e_g^4$	5	5	$0 Dq$