

Valores de  $B$  para íons de metais de transição ( $\text{cm}^{-1}$ )

	<b>M</b>	<b>M<sup>+</sup></b>	<b>M<sup>2+</sup></b>	<b>M<sup>3+</sup></b>	<b>M<sup>4+</sup></b>	<b>M<sup>5+</sup></b>	<b>M<sup>6+</sup></b>
<b>Sc</b>		480*					
<b>Ti</b>	380# 560§	583# 680§	718* 720‡§ 714#				
<b>V</b>	436# 580§	585# 660§	766* 765‡§ 760#	861* 860‡§ 886#			
<b>Cr</b>	790#§	655# 710§	830*§ 796#	918* 1030‡§ 933#	1039* 1040‡§ 1038#		
<b>Mn</b>	720#§	680# 870§	960*§ 859#	1140*§ 1130‡ 950#	1064* 1088#		
<b>Fe</b>	805#§	764# 870§	1058* 1060‡§ 897#	1015† 600‡ 1029#	1122#		
<b>Co</b>	780#§	798# 880§	971* 1120‡§ 989#	1100* 1080#	1185#		
<b>Ni</b>	1025#§	1040#§	1041* 1080‡§ 1042#	1115† 1149#	1238#		
<b>Cu</b>		1220‡#§	1240‡#§				
<b>Zr</b>	250#§	450#§	540#§				
<b>Nb</b>	300#§	260#§	530#§	604# 600§			
<b>Mo</b>	460#§	440#§		610*	680#§		
<b>Ru</b>	600#§	670#§	620#§				
<b>Rh</b>			620*	720*			
<b>Pd</b>			683* 830#§				
<b>Hf</b>	280#§	440#§					
<b>Ta</b>	350#§	480#§		562#			
<b>W</b>	370#§						
<b>Re</b>	850#§	470#§			650*		
<b>Os</b>					700*		780*
<b>Ir</b>				660*			810*
<b>Pt</b>			600*#		720*#		

\*Lever, A.B. P. *Inorganic Electronic Spectroscopy*, Elsevier, 1968. pg 164 (citando Griffith, J. S. *The Theory of Transition Metal Ions*, Cambridge, 1961; Jørgensen, C. K. *Absorption Spectra and Chemical Bonding*, Pergamon, 1962).

†Sutton, D. *Electronic Spectra of Transition Metal Complexes*, McGraw-Hill, 1968

§Figgis, B. N. *Introduction to Ligand Fields*, Robert E. Krieger, 1986.

‡Weller, M.; Overton, T.; Rourke, J.; Armstrong, F. *Química Inorgânica*, 6a ed., Bookman: Porto Alegre, 2017. pg 535.

#Pfenning, B. W. *Principles of Inorganic Chemistry*, Wiley, 2015 (citando Figgis, B. N.; Hitchman, M. A. *Ligand Field Theory and Its Applications*, Wiley-VCH, 2000).

Série nefelauxética de ligantes e íons metálicos<sup>1,2,3</sup>

Ligante	$h_x$	Metal	$k_M$
$F^-$	0,8	Mn(II)	0,07
$H_2O$	1,0	V(II)	0,08
$NH_3$	1,4	Co(II)	0,09
en	1,5	Ni(II)	0,12
$ox^{2-}$	1,5	Cr(III)	0,21
$Cl^-$	2,0	Fe(III)	0,24
$CN^-$	2,0	Co(III)	0,35
$Br^-$	2,3	Mn(IV)	0,5
$I^-$	2,7	Pt(IV)	0,5

<sup>1</sup>C. K. Jørgensen, "Absorption Spectra and Chemical Bonding in Complexes", Pergamon, 1962.

<sup>2</sup>C. K. Jørgensen, "Oxidation Numbers and Oxidation States", Springer, 1969.

<sup>3</sup>C. K. Jørgensen, "Modern Aspects of Ligand Field Theory", Elsevier, 1971

$$(1 - \beta) = h_x \times k_M$$

Valores de  $g$  ( $\text{cm}^{-1}$ ), para o cálculo de  $\Delta_o$ , para vários íons metálicos\*

Mn(II)	8,0	Ru(II)	20,0
Ni(II)	8,7	Mn(IV)	23,0
Co(II)	9,0	Mo(III)	24,6
V(II)	12,0	Rh(III)	27,0
Fe(III)	14,0	Tc(IV)	30,0
Cr(III)	17,4	Ir(III)	32,0
Co(III)	18,2	Pt(IV)	36,0
V(III) <sup>†</sup>	19,0		

\*C. K. Jørgensen, "Oxidation Numbers and Oxidation States", Springer, 1969.

<sup>†</sup> Valor de outra referência.

Valores de  $f$  ( $\text{cm}^{-1}$ ), para o cálculo de  $\Delta_o$ , para vários ligantes\*

$\text{Br}^-$	0,72	py	1,23
$-\text{SCN}^-$	0,73	$\text{NH}_3$	1,25
$\text{Cl}^-$	0,78	en	1,28
$\text{F}^-$	0,90	bpy	1,33
acetato	0,94	$\text{CN}^-$	1,7
oxalato	0,99		
$\text{H}_2\text{O}$	1,00		
$-\text{NCS}^-$	1,02		

\*C. K. Jørgensen, "Oxidation Numbers and Oxidation States", Springer, 1969.

$$\Delta_o = g \times f \times 1000 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$$

Energia de emparelhamento ( $\text{cm}^{-1}$ ) para alguns íons metálicos 3d.\*

Cr(II)	20.425	Mn(I)	14.563
Mn(III)	25.215	Fe(II)	19.150
Cr(I)	17.687	Co(III)	23.625
Mn(II)	23.825	Fe(I)	17.680
Fe(III)	29.875	Co(II)	20.800

\*J. E. Huheey, *Inorganic Chemistry*, 3a. ed., Harper&Row, 1983.

Para efeito de comparação com a energia de desdobramento do campo cristalino ( $\Delta_o$ ,  $\Delta_t$ , etc.) deve-se considerar que a energia de emparelhamento pode ser até 30% menor nos compostos de coordenação, dependendo da intensidade da covalência das ligações entre o metal e os ligantes.

Valores de  $\Delta$  ( $\text{cm}^{-1}$ ) para alguns complexos de metais de transição\*

Complexo	Nº Oxid.	Simetria	$\Delta/\text{cm}^{-1}$	Nº elétrons desemp.
$[\text{VCl}_6]^{2-}$	4	$O_h$	15.400	
$[\text{VCl}_4]$	4	$T_d$	7.900	
$[\text{CrF}_6]^{2-}$	4	$O_h$	22.000	
$[\text{CrF}_6]^{3-}$	3	$O_h$	15.060	
$[\text{Cr}(\text{OH}_2)_6]^{3+}$	3	$O_h$	17.400	
$[\text{Cr}(\text{en})_3]^{3+}$	3	$O_h$	22.300	
$[\text{Cr}(\text{CN})_6]^{3-}$	3	$O_h$	26.600	
$[\text{Mo}(\text{OH}_2)_6]^{3+}$	3	$O_h$	26.000	
$[\text{MnF}_6]^{2-}$	4	$O_h$	21.800	
$[\text{TcF}_6]^{2-}$	4	$O_h$	28.400	
$[\text{ReF}_6]^{2-}$	4	$O_h$	32.800	
$[\text{Fe}(\text{OH}_2)_6]^{3+}$	3	$O_h$	14.000	
$[\text{Fe}(\text{ox})_3]^{3-}$	3	$O_h$	14.140	
$[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$	3	$O_h$	35.000	1
$[\text{Fe}(\text{CN})_4]^{4-}$	2	$O_h$	32.200	
$[\text{Ru}(\text{OH}_2)_6]^{3+}$	3	$O_h$	28.600	
$[\text{Ru}(\text{ox})_3]^{3-}$	3	$O_h$	28.700	
$[\text{Ru}(\text{OH}_2)_6]^{2+}$	2	$O_h$	19.800	
$[\text{Ru}(\text{CN})_6]^{4-}$	2	$O_h$	33.800	
$[\text{CoF}_6]^{2-}$	4	$O_h$	20.300	
$[\text{CoF}_6]^{3-}$	3	$O_h$	13.100	4
$[\text{Co}(\text{OH}_2)_6]^{3+}$	3	$O_h$	20.760	
$[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$	3	$O_h$	22.870	0
$[\text{Co}(\text{en})_3]^{3+}$	3	$O_h$	23.160	
$[\text{Co}(\text{OH}_2)_6]^{2+}$	2	$O_h$	9.200	
$[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$	2	$O_h$	10.200	
$[\text{Co}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$	2	$T_d$	5.900	
$[\text{RhF}_6]^{2-}$	4	$O_h$	20.500	
$[\text{Rh}(\text{OH}_2)_6]^{3+}$	3	$O_h$	27.200	
$[\text{Rh}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$	3	$O_h$	34.100	
$[\text{IrF}_6]^{2-}$	4	$O_h$	27.000	
$[\text{Ir}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$	3	$O_h$	41.200	

\*J. E. Huheey, E. A. Keiter, R. L. Keiter, Inorganic Chemistry, 4a. ed., Harper&Row, 1993.