

GLORIA Y DECADENCIA DEL ENLACE POR DOS ELECTRONES 1916-1984*

Christian Klíxbüll Jørgensen

Resumen: Se discuten los números de coordinación entre 5 y 16 en compuestos inorgánicos y organometálicos y los casos especiales del paradigma de Lewis, tales como la hipótesis de hibridación y el modelo de Kimball, y son críticamente comparados con la más reciente "fertilización cruzada" entre la química cuántica y los estudios experimentales de espectros ópticos y fotoelectrónicos. La relación entre acidez y carácter oxidante es analizada brevemente.

Lewis¹ sugirió que el enlace químico típico se efectúa por dos electrones, que los elementos que se comportan bien tienen 8 electrones externos (ya sea compartidos como pares de electrones con átomos adyacentes o permaneciendo en el átomo como pares libres) y si el número de coordinación N es a lo sumo 4, entonces $2N$ de los 8 electrones forman enlaces sencillos (a los enlaces dobles o triples se les asignan 4 ó 6 electrones). En vista de que esta proposición fue hecha ocho años antes de que Stoner racionalizara la tabla periódica en n niveles, acomodando al menos $(4n+2)$ electrones, sería injusto criticar a la tabla periódica expuesta en las paredes de los peluqueros estadounidenses con electrones agrupados de dos en dos en cuatro de las esquinas de un cubo (seleccionando un tetraedro regular). Debe admitirse también que los compuestos orgánicos alifáticos, y en particular los alcanos casi no polares, son admirablemente descritos por este modelo. Sin embargo los problemas aparecen a un nivel fundamental. Los niños son adoctrinados con: "todos los compuestos consisten en moléculas". Esto es, ciertamente verdaderos en el estado gasoso a presión y temperatura razonables

(digamos, inferior a 1000°C y 20 atm.), pero la mayoría de los compuestos inorgánicos en la materia condensada (líquidos, sólidos: vítreos, amorfos y cristalinos) no contienen moléculas definidas y una gran parte son perceptiblemente no estequiométricos. La modificación de la descripción del par de electrones de Lewis con reformas y casos inorgánicos excepcionales recuerda los epiciclos ptolemaicos intentando salvar el sistema geocéntrico.

La química cuántica se ha dividido en los últimos 50 años en un área "vertical" difícil y en otra área aún más difícil (y probablemente en parte imposible) llamada "adiabática". El área "vertical" creció de los mayores triunfos de la mecánica cuántica inicial: los espectros de líneas de entidades monoatómicas^{2/3} y está ligada a excitaciones ópticas estudiadas con espectros de absorción y luminiscencia,^{7/9} y con espectros fotoelectrónicos.^{10/13} La palabra "vertical" se refiere a las curvas de potencial de una molécula diatómica. Ambas técnicas experimentales, la de excitación óptica y la de ionización fotoelectrónica obedecen el principio de Franck-Condon, que establece que los núcleos permanecen inmóviles durante el salto cuántico entre las funciones de onda electrónicas y ambas han proporcionado una gran e inesperada evidencia de la utilidad de las configuraciones de orbital molecular O.M. en cromóforos oligoató-

* Artículo tomado de la revista *Chemia* 38 (1984) Nr. 3 (März) traducido por María Eugenia Mendoza Alvarez y Cristóbal Tabares Muñoz; revisado por el autor.

micos incluyendo ambas O.M., de baja energía (parcialmente llenos o vacíos en el estado basal), O.M. de alta energía llenos (H.O.M.O.) y O.M. penúltimos (previamente considerados como artefactos de cálculo). La condensación de átomos a elementos metálicos o enlazados químicamente (N. del trad.: cuando se trata de átomos diferentes) origina cambios en los niveles internos y esto típicamente modifica las energías de ionización entre unos 5 y 10 eV (mayor que las energías de disociación de enlace usuales). Las relaciones entre las series isoelectrónicas con $K = (Z - z)$ electrones (siendo Z el número atómico y z el estado de oxidación), y los espectros de rayos X, enfatizadas por vez primera por Kossel en 1916,^{14/16} no están determinadas solamente por las cargas atómicas fraccionarias y por el potencial de Madelung debido a los iones circundantes,^{5/17} sino también intervienen en una extensión comparable los efectos de relajación^{12/18} que están íntimamente ligados a la idea de polarizabilidad química.¹⁹

Las reacciones químicas son adiabáticas en el sentido de que los núcleos se mueven, y una gran dificultad para la química cuántica es que el movimiento tiene lugar en superficies de potencial de $(3n-5)$ dimensiones (puesto que 6 grados de libertad translacional y rotacional son eliminados en la aproximación de Born-Oppenheimer cuando n es al menos 3).

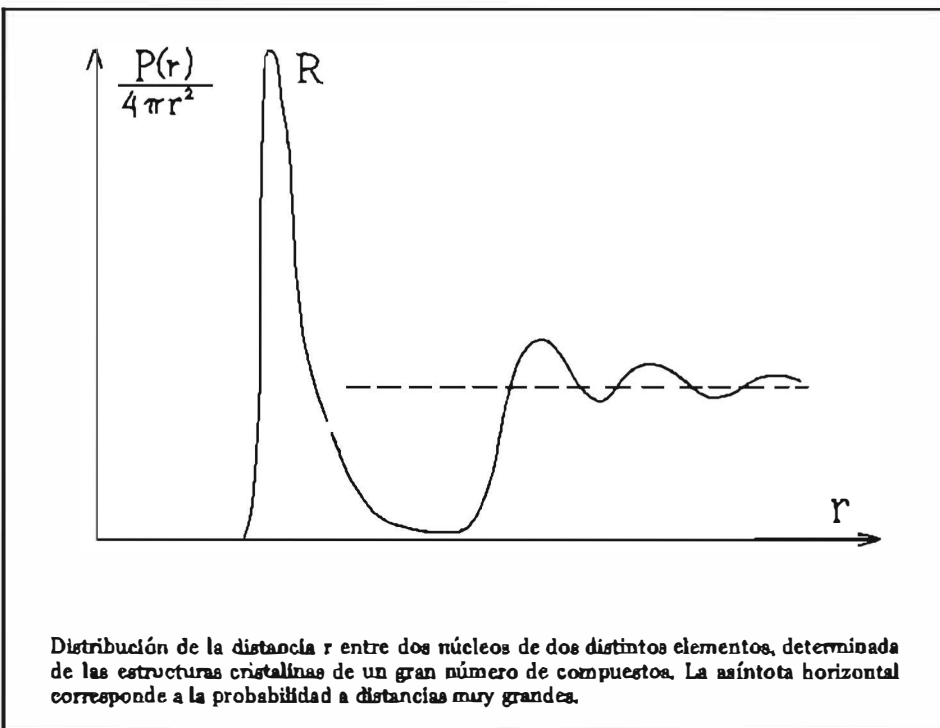
Actualmente es apropiado decir que la química es la adaptación mutua de la densidad electrónica a un conjunto de núcleos con cargas Z_1, Z_2, \dots desplazados hacia mínimos de energía relativa o absoluta. La constitución interna de los núcleos tendría poca relevancia para los químicos si no fuera por la reciente evidencia²⁰ de que el niobio puede contener quarks insaturados en una proporción de uno por 10^{20} unidades de peso atómico (ó 6000/g.). Tales portadores de carga fraccionaria^{21/25} intercalan nuevos "elementos" con $(Z \pm 1/3)$ en la tabla periódica, para los cuales se espera que ocurra un fuerte fraccionamiento geoquímico, porque no pueden ser completamente neutralizados por los electrones.

En una descripción estática de los "enlaces químicos", la proposición para eliminar es que un gas ideal de puntos geométricos tiene una distribución de probabilidad radial $P(r)$ relativa a un punto en el origen proporcional a $4\pi r^2 dr$. Es más informativo dividir una $P(r)$ observada por este factor. Estudios de difracción de rayos X de sólidos cristalinos indican casi exactamente (o exactamente) las posiciones nucleares de

equilibrio; éstas pueden ser encontradas también por difracción de neutrones. Si estas dos técnicas se aplican a líquidos y vidrios (o difracción de electrones a moléculas gaseosas) es aún posible estimar $P(r)$ a pesar de que la forma angular ya no puede ser determinada. Si graficamos $P(r)$ para un gran número de casos de dos núcleos Z_1 y Z_2 , es bien sabido que valores muy pequeños de r no ocurren. Un máximo fuerte y angosto ocurre a $r = R$, que consideramos como una manifestación de "enlace químico" (ver figura). La mitad del ancho de este máximo tiene el orden de magnitud de 0.1 Å, y no es mucho más extenso que la dispersión media a temperatura ambiente debido a las vibraciones térmicas. El pico en R es algo asimétrico, es mucho más frecuente para un "enlace" ser $(R + 0.2)$ que $(R - 0.2)$ Å. Casos de excepcionalmente baja tales como N_2 comparado con hidrazina o azobenceno; y los 2 enlaces uranilo⁸ un $UO_2(O_2NO_3)$ frecuentemente corresponden a muy baja reactividad química. El máximo de $P(r)$ en R es seguido por un valle amplio con muy pocos ejemplos (interacciones débiles azufre-azufre y yodo-yodo pueden caer en este intervalo, y tradicionalmente enlaces cortos de hidrógeno FHF⁻ y OHO también se incluyen, porque los átomos de H son difíciles de localizar con rayos X) antes, un paisaje montañoso de "contactos Van der Waals" comenzando aproximadamente 1 Å más allá de R . Slater²⁶ reactivó la idea de los Bragg de que los átomos muestran aproximada-

mente un radio constante en la materia condensada. Una pantalla de humo a favor de esta pregunta es que el radio iónico de un catión se dice ser 0.8 Å pequeño que el "radio covalente" elemento M , y el anión 0.8 Å mayor el "radio covalente" de X , con el resultado de que la r observada típicamente dispersa sólo 0.1 Å de las dos clases de radios $M + X$. Debe agregarse con todo candor que los radios iónicos de Goldschmidt son fijados asumiendo contacto directo entre aniones esféricos en LiI (tipo NaCl) y CeO_2 (tipo CaF_2). Debe notarse también que la distancia internuclear Ca-Cs en el CaF (tipo NaCl) es mucho más corta que en el Cs metálico, sin ninguna evidencia de un "enlace intermetálico" en el fluoruro.

El número de coordinación N no está siempre bien definido. El es el número de "enlaces" si todos los átomos vecinos más próximos, con el mismo Z , muestran la misma r . Es una cuestión de gusto qué tan largos (digamos 1.10 a 1.15 R) pueden ser los enlaces no equivalentes y continuar siendo contados en N . Tales casos fueron recientemente discutidos²⁷ con énfasis sobre $N > 4$, proporcionando contraejemplos al paradigma de Lewis. La estereoquímica más común para $N = 5$ es la bipirámide trigonal, aunque tales especies (como el PCl_5 gaseoso) frecuentemente se rompen (en PCl_3 y PCl_6 sólido). Pirámides tetragonales ocurren en los isoelectrónicos con $K=48$, TeF_5 , IF_5 , XeF_5 y $OXeF_4$, el ión vanadilo $VO(OH_2)_4^{+2}$, en $Cu(NH_3)_5^{+2}$, en el $Ni(CN)_5^{-3}$ anaranjado ($3d^8$ diamagnético).



co con $S=0$) y el $\text{Co}(\text{CN})_5^{3-}$ verde ($S=1/2$), capaz de formar un dímero morado isostérico e isoelectrónico con $(\text{OC})_5\text{MnMn}(\text{CO})_5$ de dos octaedros pegados mientras que no se sabe que el F_5SSF_5 monomérico a SF_5 . Para $N=6$, la simetría octaédrica es la más frecuente y como fue señalado primero por Werner, ocurre en la mayoría de los complejos del grupo d.

Una serie isoelectrónica de complejos del grupo principal es AlF_6^{3-} , SiF_6^{2-} , PF_6^- , SF_6 y ClF_6^+ . Se sabe que $\text{Mg}(\text{II})$, $\text{Al}(\text{III})$, $\text{Zn}(\text{II})$ y $\text{Ga}(\text{III})$ forman acuosos octaédricos en solución. Casos excepcionales de $N=6$ son el prisma trigonal de ligandos conteniendo azufre⁵ y los dos sitios de baja simetría de M_2O_3 cúbico tipo-C (isotípico con Be_3P_2 y Mg_3P_2).

A partir de $N=7$, generalmente hay muy poca preferencia²⁸ para $N=8, 9, 10, \dots$ ni por una estereoquímica definida para un N dado. Las sales cristalinas de neodimio (III) se sabe que contienen $\text{Nd}(\text{OH}_2)_9^{3+}$ con la misma simetría trigonal que el complejo de renio (VII) ReH_9^{2-} pero no se conoce²⁹ si el $\text{Nd}(\text{III})$ en solución acuosa contiene una mezcla de $N=9$ y 8. Un cuidadoso estudio mediante difracción de neutrones³⁰ de soluciones fuertes de cloruro de calcio indica una mezcla en el rango $N=10$ a 6. Los seis ligandos nitrato bidentados se sabe que proveen aproximadamente $N=12$, icosaédrico en sales que contienen $\text{Nd}(\text{O}_2\text{NO})_6^{3-}$, $\text{Ce}(\text{O}_2\text{NO})_6^{2-}$ y $\text{Th}(\text{O}_2\text{NO})_6^{2-}$.

Aunque sólo admitido reluctantemente por los libros de texto, los compuestos organometálicos frecuentemente muestran $N=9$ a 16. Los complejos sandwich (con distancias M-C idénticas) de ciclopentadienilo, benceno y ciclotetraenilo tales como los $3d^6$ $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$ y $\text{Co}(\text{C}_5\text{H}_5)_2^+$ tienen $N=10$, el $3d^6$ $\text{Cr}(\text{C}_6\text{H}_6)_2$ y el $3d^5$ ($S=1/2$) $\text{Cr}(\text{C}_6\text{H}_6)_2$ (fácilmente obtenido por oxidación) tienen $N=12$, como el complejo mixto $4d^6$ involucrando el catión tropililo $(\text{C}_5\text{H}_5)\text{Mo}(\text{C}_7\text{H}_7)^+$, y los $\text{Ce}(\text{C}_8\text{H}_8)_2^+$, $\text{Th}(\text{C}_8\text{H}_8)_2$, $\text{U}(\text{C}_8\text{H}_8)_2$ y $\text{Am}(\text{C}_8\text{H}_8)_2$ todos tienen $N=16$.

El mismo alto valor de N es conocido en muchos complejos de $\text{U}(\text{IV})$, $(\text{C}_5\text{H}_5)_3\text{UX}$ con un X unidentado, y en el aducto ciclohexilnitrilo $(\text{C}_5\text{H}_5)_3\text{YbCNC}_6\text{H}_{11}$.

La teoría de hibridación contiene el paradigma de Lewis como suposición esencial, como se discutió previamente.^{31/32} En este punto, los elementos ligeros de Be a F están en una posición más favorable que todos los elementos subsiguientes, en el sentido de que las funciones radiales 2s y 2p en una mayor aproximación pueden ser puestas fuera

de un paréntesis (a ser multiplicadas por una combinación lineal de funciones angulares perteneciendo a $\ell=0$ y $\ell=1$). La razón física detrás de este resultado es que el centro atómico pequeño de sólo 2 electrones casi coincide con el núcleo. Es probablemente una cuestión de tamaño atómico relativo que NF_4^+ y ONF_3 son conocidos (pero no el NF_5) y no debería despreciarse que el oxígeno y el nitrógeno tienen $N=6$ en MgO , MnO , NiO , CdO y LaN , que son tipo NaCl y el carbono tiene $N=6$ en las moléculas $\text{Li}_4(\text{CH}_3)_4$ y $\text{CRu}_6(\text{CO})_{17}$ y en los carburos tipo NaCl .

El Be_2C ámbar amarillo (no metálico) tipo CaF_2 es un caso interesante. No solamente $N=8$ para el carbono sino además un mol de carburo de berilio contiene 6 moles de electrones 1s de capa interna y 8 moles de electrones débilmente enlazados, a ser comparados con los 16 moles requeridos por el paradigma 2N.

Hay otro punto donde los valores de 2 dígitos de Z forman su propia categoría. El átomo de sodio y todos los átomos subsiguientes tienen la energía de correlación (relativa a la configuración bien definida optimizada en la función de onda de Hartree-Fock) mayor que la primera energía de ionización eliminando el fundamento del principio de variación. La utilidad de las configuraciones electrónicas (también para los elementos trans-neonianos se ramifica a valores K clasificatorios en compuestos. Valores positivos de S están también implícitamente convertidos en improbables por el paradigma de Lewis, aunque $S=5/2$ es particularmente más estable^{11/31} en manganeso (II) y hierro (III), y $S=7/2$ en europio (II), gadolinio (III) y terbio (IV).^{7/33}

En tiempos más recientes, la teoría de "campo ligando" es frecuentemente usada en sentido contrario, en el número de electrones en la capa d parcialmente llena (y el valor S es evaluado del espectro de absorción observado asumiendo N y simetría posibles). La tesis defendida (27) de que N está determinada principalmente por las dimensiones atómicas relativas puede obviamente no ser toda la verdad. Cuando la especie anfótera en solución alcalina es el $\text{Be}(\text{OH})_4^{2-}$ o el $\text{Pb}(\text{OH})_3^-$, o cuando TiCl_4 tetraédrico se encuentra en ácido clorhídrico fuerte (donde $\text{Co}(\text{NH}_3)_6(\text{TiCl}_6)$ puede ser precipitado al mismo tiempo) otros efectos influyen N . Podría seguirse argumentando que $N=3$ en BF_3 y NO_3^- debido al átomo central pequeño, pero $N=2$ debe ser favorecido por enlace covalente específico. $\text{Au}(\text{I})$, $\text{Hg}(\text{II})$ y $\text{Tl}(\text{III})$ muestran $N=2$ lineal como yodo(I) y xenón(II) en la serie isoelec-

trónica BrAuBr^- , BrHgBr^- , NCAuCl^- , NCH_2CN , $\text{H}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$, $\text{H}_3\text{CTiCH}_3^+$, H_3NAuNH_3 y H_3NHgNH_3 .

Una coordinación similar puede deberse a un impedimento estérico como en $(\text{H}_3\text{C})_3\text{CBeC}(\text{CH}_3)_3$ (cuando se compara con $N=4$ para el berilio en Be_2C), pero no puede ser despreciado que el HgF_2 , tipo CaF_2 tiene $N=8$. El anterior K=78 tiene $N=4$ para $\text{Os}(\text{PF}_3)_4^{2-}$ e $\text{Ir}(\text{PF}_3)_4^-$.

Una complicación adicional es que $N=2$ puede ser curvo más que lineal. Debe notarse que la pérdida de estabilización de Madelung⁵ yendo de tetraédrico a cuadrático ($N=4$) es casi despreciable, aunque la última simetría (exceptuando las restricciones estereoquímicas de ligandos macrocíclicos) está concentrada en pocos valores de K, tales como los sistemas p^2 : bromo(III), yodo(III) y xenón(IV) y los sistemas diamagnéticos d^8 . Contrariamente al CO_2 lineal, las especies monoméricas NO_2 , NO_2^- , O_3 , O_3^- , SO_2 y S_3^- (conocida por provocar el color azul³⁴ de lapislázuli) son curvas. Esto puede tener alguna relación con los pares libres, pero Lewis no explica por qué O_3 no dimeriza (como tampoco lo hacen O_2^+ , O_2^- ni ClO_2). Un resultado bastante tantalizante³⁵ es que CaCl_2 , CaBr_2 , SrBr_2 y SrI_2 gaseosos son lineales (como podría esperarse del enlace electrovalente o de cualquier otra hipótesis) pero CaF_2 , SrF_2 , SrCl_2 gaseosos y los 4 halogenuros de bario son curvos. El químico de escritorio puede comenzar diciendo que los orbitales 4d y 5d están involucrados, pero una alternativa anticlímax es que cuando la relación entre los radios iónicos de Goldschmidt de los cationes alcalino-térreos y del anión haluro es mayor que 0.648, la molécula es curva pero, ¿por qué?

El hidrógeno(I) central en la molécula simétrica FHF^- fue una espina en el cuello para el paradigma 2N. Sin embargo, los puentes hidruro^{27/36} son también muy fascinantes. Recientemente se mostró que el puente de hidruro en $(\text{OC})_5\text{CrHCr}(\text{CO})_5^-$ es curvo.³⁷ Este complejo de cromo(0) es análogo a las especies puenteadas con yodo. El diborano $\text{H}_2\text{BH}_2\text{BH}_2$ y $\text{Zr}(\text{H}_3\text{BH})_4$ (teniendo $N=12$ como el $\text{U}(\text{H}_3\text{BH})_4$ sincristalizado³⁸ en el boranato de hafnio(IV)) también muestran puentes hidruro curvos. Por otra parte, los hidruros LiH , NaH , KH , RbH , CaH de tipo NaCl (no metálicos) tienen $N=6$ octaédrico. Las perovskitas BaLiH_3 también muestran $N=6$ para el hidruro estando enlazado a

2 $l_i(l_i)$ sobre un eje cartesiano y a 4 $M(II)$ en los otros dos ejes.

El paradigma de $2N$ electrones (1916) está más lejos que nunca de la universalidad. Como muchas explicaciones no dignas de confianza hace predicciones correctas en cerca de 1/3 de los casos. Realmente es conveniente plantearse la pregunta opuesta: ¿por qué el paradigma funciona para los alcanos, los iones tetraalquilamonio, el diamante, el arseniuro de galio y H_2 ? ¿Existe una correspondencia específica entre los O.M. (desde un punto de vista más amplio) y el conjunto de base de las funciones de pares de electrones de enlace (¿ortogonalizadas?), en estos casos sin pares libres?

Además de que la teoría de hibridación está casi colapsando, otra consecuencia del paradigma de Lewis es el modelo Kimball³⁹ de pares de electrones confinados en esferas individuales sin recubrimiento. También en este caso la

importancia del operador de energía cinética¹⁷, para el enlazamiento químico ha sido subestimada. Parece que en 1916 la diferencia energética entre los electrones (o más estrictamente hablando, entre sus O.M.) en un compuesto dado no era evidente. Aunque Kassel¹⁴ ciertamente consideró valores cuantitativos de energía derivados de los espectros atómicos^{5/40} y de los rayos X, los que en esta situación fueron los precursores de los espectros fotoelectrónicos.

Hay una estrecha conexión entre la teoría del carácter oxidante (es decir, la afinidad electrónica en las especies químicas) y la teoría del comportamiento ácido,^{36/41} aunque no debemos despreciar los casos (más bien raros) de antibases fuertes no oxidantes (ácidos de Lewis) tales como el boro(III) y aluminio(III) que sirven como excepciones muy significativas para mostrar que existe una diferencia entre el comportamien-

to ácido y el carácter oxidante. Aunque H_3O^+ puede oxidar (reversiblemente a $pH=7$) $Mn(CO)_5^-$ para dar el complejo de manganeso(I), $HMn(CO)_5$ y el H_3O^+ oxida violentamente II^- a H_2 , un solo contraejemplo basta para mostrar que no todas las antibases son perceptiblemente oxidantes. Hay sin embargo una débil duda:⁵ el $H_3BMn(CO)_5^-$ es un complejo de Mn(I) de un ligando no reconocido previamente, BH_3^- isoelectrónico con CH_3^- y NH_3 . Por otra parte es un hecho experimental²⁷ que los iones acuosos de Fe(III), Cu(II), Pd(II), Hg(II), Tl(III) y muy en el extremo Au(III) son ácidos de Bronsted mucho más fuertes que los iones con el mismo valor de z y radios similares.

La idea de Lavoisier de que todos los ácidos contienen oxígeno encontró múltiples excepciones y finalmente desapareció. El paradigma de $2N$ electrones en N enlaces no está en mejor situación.

REFERENCIAS

- 1 G.N. Lewis: J. Am. Chem. Soc. 38, 762 (1916).
- 2 C.K. Jorgensen: Israel J. Chem. 19, 174 (1980).
- 3 C.K. Jorgensen: Int. Rev. Phys. Chem. 1, 225 (1981).
- 4 C.K. Jorgensen: Adv. Chem. Phys. 5, 33 (1963).
- 5 C.K. Jorgensen: Oxidation Numbers and Oxidation States, Springer-Verlag, Berlin (1969).
- 6 C.K. Jorgensen: Progress Inorg. Chem. 12, 101 (1970).
- 7 R. Reisfeld und C.K. Jorgensen: Lumers and Excited States of Rare Earths, Springer-Verlag, Berlin (1977).
- 8 C.K. Jorgensen and R. Reisfeld: Structure and Bonding, 50, 121 (1982).
- 9 C.K. Jorgensen and R. Reisfeld: J. Electrochem. Soc. 130, 681 (1983).
- 10 C.K. Jorgensen and H. Berthou: Mat. Fys. Medd. Dn. Vid. Selskab (Copenhagen) 38, no. 15 (1972).
- 11 C.K. Jorgensen: Chimia, 28, 6 (1974) and 29 53 (1975).
- 12 C.K. Jorgensen: Structure and Bonding, 22, 49 (1975) and 30, 141 (1976).
- 13 C.K. Jorgensen: Fresenius Z. Analyt. Chem. 288, 161 (1977).
- 14 W. Kassel: Ann. Physik 49, 229 (1916).
- 15 C.K. Jorgensen: Chimia, 30, 490 (1976).
- 16 C.K. Jorgensen: Adv. Quantum Chem. 11 51 (1978).
- 17 C.K. Jorgensen: Modern Aspects of Ligand Field Theory, North-Holland Publ. Co., Amsterdam (1971).
- 18 C.K. Jorgensen: Adv. Quantum Chem. 8, 137 (1974).
- 19 C.K. Jorgensen: Topics Current Chem. 56, 1 (1975).
- 20 G.S. LaRue, J.D. Phillips and W.M. Fairbank: Phys. Rev. Lett; 46, 967 (1981).
- 21 C.K. Jorgensen: Structure and Bonding 34, 19 (1978) and 43, 1 (1981).
- 22 C.K. Jorgensen: Naturwiss. 69, 420 (1982) and 71, 151 (1984).
- 23 C.K. Jorgensen: Nature 305, 787 (1983).
- 24 K.S. Lackner and G. Zweif: Phys. Rev. D28, 1671 (1983).
- 25 C.K. Jorgensen: J. Phys. Chem., to be submitted.
- 26 J.C. Slater: J. Chem. Phys. 41, 3199 (1964).
- 27 C.K. Jorgensen: Revue Chimie min. (Paris) 20, 533 (1983).
- 28 C.K. Jorgensen and R. Reisfeld: Topics Current Chem. 100, 127 (1982).
- 29 A.H. Narten and R.L. Hahn: J. Phys. Chem. 87, 3193 (1983).
- 30 N.A. Hewish, G.W. Neilson and J.E. Fenderby: Nature 297, 138 (1982).
- 31 C.K. Jorgensen: Absorption Spectra and Chemical Bonding in Complexes, Pergamon Press, Oxford (1962).
- 32 C.K. Jorgensen: Chimia 25, 109 (1971).
- 33 C.K. Jorgensen: Chimia 34, 381 (1980).
- 34 R.J. H. Clark, T.J. Dineen and M. Kurmoo: Inorg. Chem. 22, 2766 (1983).
- 35 L. Wharton, R.A. Berg and W. Klemperer: J. Chem. Phys. 39, 2023 (1963).
- 36 C.K. Jorgensen: Chimia 28, 605 (1974).
- 37 J. Rozière, P. Teulon and M.D. Grillone: Inorg. Chem. 22, 557 (1983).
- 38 F.R. Bernstein and T.A. Kelderling: J. Chem. Phys. 59, 2105 (1973).
- 39 C.K. Jorgensen: Chimia 31, 445 (1977).
- 40 C.K. Jorgensen: Comments Inorg. Chem. 1, 123 (1981).
- 41 C.K. Jorgensen: Naturwiss. 67, 188 (1980).