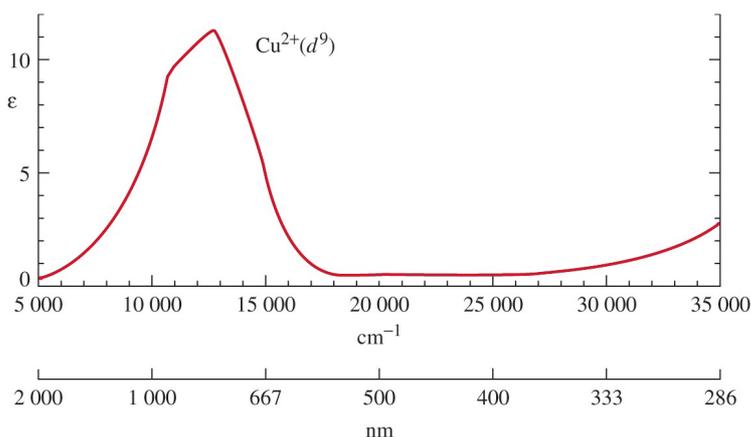


# QUÍMICA INORGÁNICA AVANZADA

## COMPUESTOS DE COORDINACIÓN

### Espectroscopia óptica

La mayoría de los compuestos de coordinación tienen vivos colores. Los espectros de absorción UV-Vis permiten evaluar el efecto de los **L** sobre los orbitales *d* del **M**, se obtienen cuando luz de longitud de onda adecuada e intensidad ( $I_0$ ) pasa por una solución que contiene el complejo. Por ejemplo el complejo octaédrico  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$  es de color azul ( $\lambda_{\text{max}} \approx 800 \text{ nm}$ ):



longitud de onda (nm)	color absorbido	color complementario
650-780	rojo	verde azulado
595-650	naranja	azul verdoso
560-595	amarillo verdoso	púrpura
500-560	verde	rojo-púrpura
490-500	verde azulado	rojo
480-490	azul verdoso	naranja
435-480	azul	amarillo
380-435	violeta	amarillo verdoso

Todos estos colores surgen de **transiciones electrónicas** entre niveles cuyos espaciados corresponden a las longitudes de onda disponibles en la parte **visible** del espectro electromagnético, no siempre es posible predecir el color a partir de los espectros de absorción UV-Vis porque muchos compuestos de coordinación tienen más de una banda de absorción con distintas energías e intensidades. En los diagramas de niveles de energía se basan en **modelos de un electrón** (no se consideran las repulsiones entre un electrón y otro).

### Términos espectroscópicos

**Números cuánticos de átomos multieletrónicos:** la absorción de la luz da como resultado la excitación de electrones desde un estado de menor a uno de mayor energía, como los estados están cuantizados se observa la absorción en bandas, la energía de cada banda corresponde a la diferencia entre el estado inicial y final. Las frecuencias de absorción **no** son en general una medida directa del desdoblamiento del campo de los ligandos. Debe considerarse como los electrones en los átomos pueden interactuar entre ellos.

Para un átomo como el C de configuración:  $1s^2 2s^2 2p^2$ , se esperaría que los electrones tengan la

misma energía en forma independiente cada electrón  $2p$  puede tener cualquiera de estas combinaciones:

$$n=2 \quad l=1$$

$$m_l = +1, 0, -1 \quad (3 \text{ posibles valores})$$

$$m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \quad (2 \text{ posibles valores})$$

los electrones  $p$  no son independientes entre sí, sino que pueden interactuar.

**Acoplamiento de Russell-Saunders:** las interacciones entre electrones produce estados atómicos llamados **microestados** que se pueden describir por nuevos números cuánticos:

$$M_L = \sum m_l \quad \text{momento angular orbital total}$$

$$M_S = \sum m_s \quad \text{momento angular de espín total}$$

Se pueden tabular todos los posibles microestados, asegurarse de que dos electrones en el mismo microestado no tengan el mismo número cuántico (se aplica el principio de exclusión) y contar solamente microestados únicos.

**número total de microestados** =  $i!/[j! (i-j)!]$ , donde:  $i$ = número de combinaciones de  $m_l, m_s$  y  $j$ = número de electrones.

Para los 2 electrones  $2p$ :  $m_s = +$  (para  $+\frac{1}{2}$ ) y  $-$  (para  $-\frac{1}{2}$ ).

- primer electrón:  $m_l = +1 \quad m_s = +\frac{1}{2}$
  - segundo electrón:  $m_l = 0 \quad m_s = -\frac{1}{2}$
- } **notación  $1^+0^-$**

**Número de microestados** =  $6!/[2! (6-2)!] = 720/48 = 15$  **microestados**

- $i$ = número de combinaciones de  $m_l (3) \times m_s (2) = 6$
- $j$ = número de electrones = 2

			$M_S$		
$m_l = +1$	$m_l = 0$	$m_l = -1$	-1	0	+1
$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow$		$1^+ \quad 1^-$	
$\uparrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	$1^- \quad 0^-$	$1^+ \quad 0^-$ $1^- \quad 0^+$	$1^+ \quad 0^+$
$\downarrow$	$\downarrow$	$\downarrow$	$-1^- \quad 1^-$	$-1^+ \quad 1^-$ $0^+ \quad 0^-$ $-1^- \quad 1^+$	$-1^+ \quad 1^+$
$\uparrow$	$\uparrow$	$\uparrow$	$-1^- \quad 0^-$	$-1^+ \quad 0^-$ $-1^- \quad 0^+$	$-1^+ \quad 0^+$
$\downarrow$	$\downarrow$	$\downarrow$		$-1^+ \quad -1^-$	

Los microestados que corresponden a diferentes distribuciones espaciales relativas a los electrones tienen energías distintas. Si se agrupan los microestados de la misma energía se obtienen niveles de energía que son distinguibles espectroscópicamente: **términos**.

Para los **metales de la serie 3d** la propiedad más importante de un microestado para determinar su energía es la orientación relativa de los espines de los electrones, seguida de la orientación relativa de los momentos angulares orbitales. Para los **metales pesados de las serie 4d y 5d** la orientación relativa de los espines de los electrones o los momentos orbitales no son tan importantes, se acoplan por **acoplamiento espín-órbita**.

**Números cuánticos que describen los estados de átomos multielectrónicos:**

**S** = número cuántico del momento angular de espín total

**L** = número cuántico del momento angular orbital total

**J** = número cuántico de momento angular total

Definen colecciones de microestados. Se determinan por la suma vectorial de los números cuánticos individuales.

**estados atómicos**

$$M_L = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm L$$

$$M_S = S, S-1, S-2, \dots S$$

para un átomo con una configuración  $d^2$ :

$$l_1 = 2, l_2 = 2$$

$$s_1 = +\frac{1}{2}, s_2 = -\frac{1}{2}$$

$$L = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots |l_1 - l_2| = 2+2, 2+2-1, \dots |2-2| = 4, 3, 2, 1, 0$$

$$S = s_1 + s_2, s_1 + s_2 - 1, \dots |s_1 - s_2| = 1, 0$$

Los valores de  $L$  corresponden a distintos estados atómicos:

$L$	nombre del estado
0	S
1	P
2	D
3	F

Los valores de  $S$  se usan para calcular la **multiplicidad de espín** de los distintos estados atómicos:

$$2S + 1$$

$S$	nombre del estado
1	singlete (singulete)
2	doblete
3	triplete
4	cuartete

Los estados atómicos caracterizados por  $L$  y  $S$  se suelen llamar **términos de iones libres** (o **términos de Russell-Saunders**):

término	$L$	$S$
$1S$	0	0
$2S$	0	$\frac{1}{2}$
$3P$	1	1
$4D$	2	$\frac{3}{2}$
$5F$	3	2

Para un término  $1S$ :  $L = 0, M_L = 0; S = (2S + 1) = 0, M_S = 0$

**1 microestado**

$M_S$		$M_S$			
0		0			
$M_L$	0	$0^0$	$M_L$	0	x

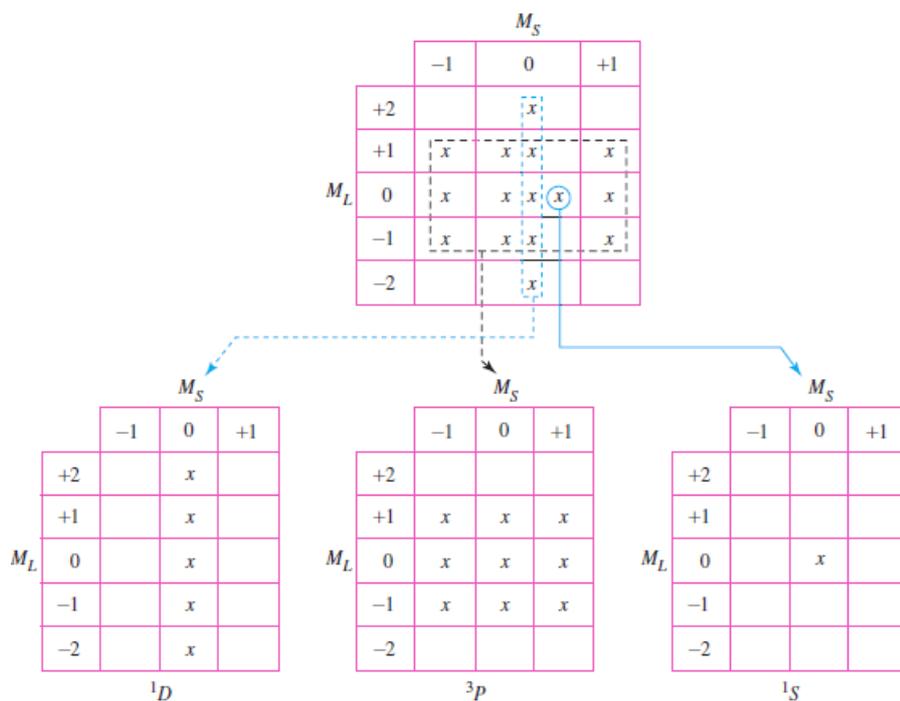
Para un término  $2P$ :  $L = 1, M_L = +1, 0, -1; S = (2S + 1) = 2, M_S = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 0$

**6 microestados**

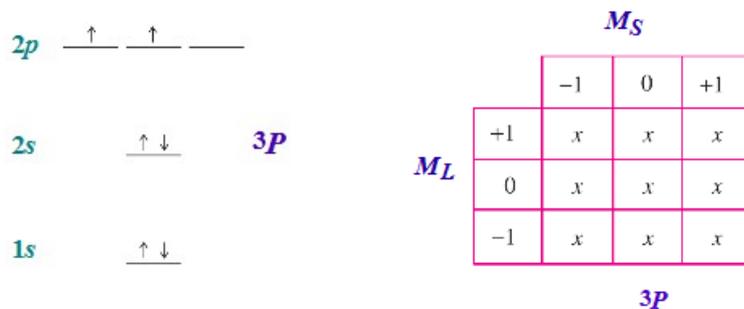
$M_S$			$M_S$				
$-\frac{1}{2}$			$+\frac{1}{2}$				
$M_L$	1	$1^-$	$1^+$	$M_L$	1	x	x
	0	$0^-$	$0^+$		0	x	x
	-1	$-1^-$	$-1^+$		-1	x	x

Cada término es un arreglo rectangular de microestados. Para los 2 electrones 2p: **15 microestados** y 3 **términos** =  $^3P, ^1D, ^1S$ .

$m_l = +1$	$m_l = 0$	$m_l = -1$	$M_L$	$M_S$	$M_J$
$\uparrow\downarrow$			2	0	2
	$\uparrow\downarrow$		0	0	0
		$\uparrow\downarrow$	-2	0	-2
$\uparrow$	$\uparrow$		1	1	2
$\uparrow$		$\uparrow$	0	1	1
	$\uparrow$	$\uparrow$	-1	1	0
$\downarrow$	$\downarrow$		1	-1	0
$\downarrow$		$\downarrow$	0	-1	-1
	$\downarrow$	$\downarrow$	-1	-1	-2
$\uparrow$	$\downarrow$		1	0	1
$\downarrow$	$\uparrow$		1	0	1
$\uparrow$		$\downarrow$	0	0	0
$\downarrow$		$\uparrow$	0	0	0
	$\uparrow$	$\downarrow$	-1	0	-1
	$\downarrow$	$\uparrow$	-1	0	-1



Los **términos** tienen diferentes energías que se pueden ordenar considerando la **regla de Hund de la máxima multiplicidad**. A mayor multiplicidad menor energía, en este ejemplo:



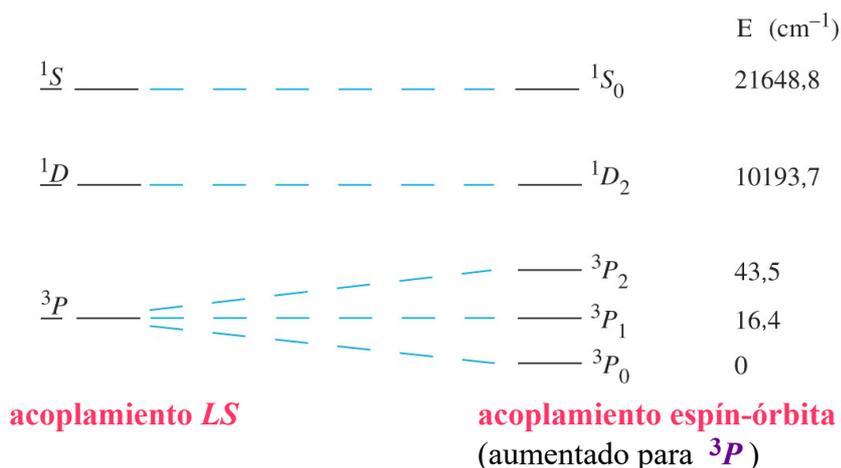
Si dos o más términos tienen la misma multiplicidad de espín se aplica la **segunda regla de Hund**: el estado fundamental es aquel que posee el mayor valor de L, por ejemplo si se tienen los términos  $^4P$  y  $^4F$  en una misma configuración electrónica,  $^4F$  es el estado de menor energía.

**Acoplamiento espín-órbita:** importante para átomos con  $z > 40$ . Se combinan los números cuánticos  $L + S$  para dar el número cuántico de momento angular total:

$$J = L + S, L + S - 1, \dots |L - S|$$

Los términos de iones libres se pueden desdoblar. El estado de menor energía se puede predecir considerando la **tercera regla de Hund**: para subcapas incompletas (menos que semillenas) el estado de menor energía es el que tiene el menor valor de  $J$ , para subcapas incompletas (más que semillenas) el estado de menor energía es el que tiene el valor mayor de  $J$ .

**Diagrama de energía para el átomo de carbono:** el término  $^3P$  se desdobla



**Parámetros de Racah:** resumen los efectos de la repulsión electrón-electrón sobre la energía de los términos de una configuración. Son expresiones cuantitativas de las ideas de las reglas de Hund y explican las desviaciones a estas reglas:

$A$ : promedio de la repulsión interelectrónica total

$B$  y  $C$  relacionados con la repulsión entre electrones  $d$  individuales

$B$  es el de mayor interés en compuestos de coordinación

Cada término derivado de una configuración tiene una energía que se puede expresar como una combinación lineal de los tres **parámetros de Racah**. Los valores de  $A$ ,  $B$  y  $C$ : se pueden determinar si se igualan las expresiones a las energías observadas de los términos, por representar repulsiones son todos positivos. Por ejemplo, para una configuración  $d^2$

$$E(^1S) = A + 14B + 7C$$

$$E(^3P) = A + 7B$$

$$E(^1G) = A + 4B + 2C$$

$$E(^1D) = A - 3B + 2C$$

$$E(^3F) = A - 8B$$

si  $C > 5B$ , las energías de los términos quedan en un orden similar al obtenido con las reglas de Hund:  $^3F < ^3P < ^1D < ^1G < ^1S$

si  $C < 5B$ ,  $^3F < ^1D < ^3P < ^1G < ^1S$ , la ventaja de tener una ocupación de orbitales correspondiente a un momento angular orbital elevado es más grande que la ventaja de tener una multiplicidad elevada.

**Parámetros de Racah** de algunos iones del bloque  $d$ ,  $B$  en cm<sup>-1</sup> ( $B/C$ )

	1+	2+	3+	4+
Ti		720 (3,7)		
V		765 (3,9)	860 (4,8)	
Cr		830 (4,1)	1030 (3,7)	1040 (4,1)

Mn		960 (3,5)	1130 (3,2)
Fe		1060 (4,1)	
Co		1120 (3,9)	
Ni		1080 (4,5)	
Cu	1220 (4,0)	1240 (3,8)	

$C \approx 4 B$ , para los iones de la tabla las reglas de Hund no son confiables para predecir orden de energías más allá del término basal de una configuración.

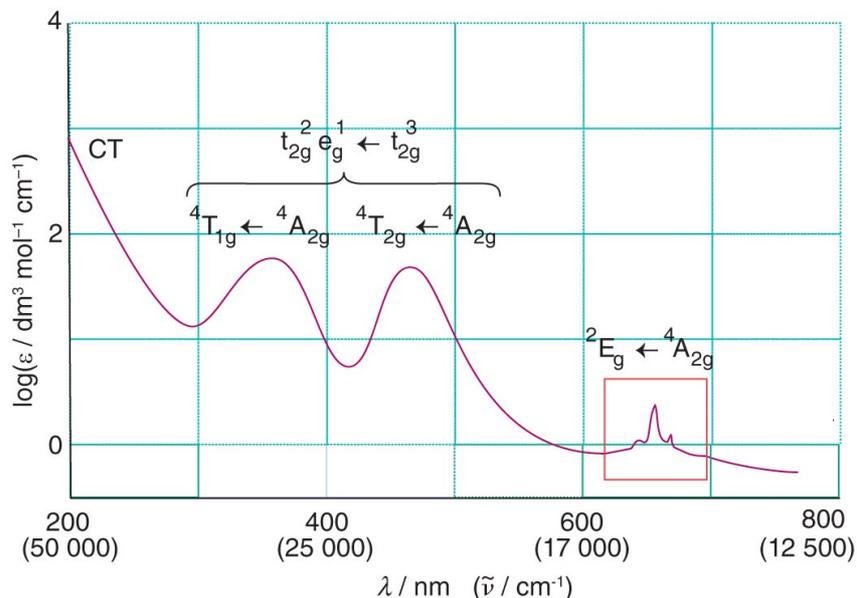
### Correlación entre términos

términos de ion libre para configuraciones  $d^n$

$d^1$	$2D$				
$d^2$		$1S$ $1D$ $1G$	$3P$ $3F$		
$d^3$	$2D$		$4P$ $4F$ $2P$ $2D$ $2F$ $2G$ $2H$		
$d^4$	$5D$	$1S$ $1D$ $1G$	$3P$ $3F$ $3P$ $3D$ $3F$ $3G$ $3H$	$1S$ $1D$ $1F$ $1G$ $1I$	
$d^5$	$2D$		$4P$ $4F$ $2P$ $2D$ $2F$ $2G$ $2H$	$2S$ $2D$ $2F$ $2G$ $2I$	$4D$ $4G$ $6S$
$d^6$	igual que $d^4$				
$d^7$	igual que $d^3$				
$d^8$	igual que $d^2$				
$d^9$	igual que $d^1$				
$d^{10}$	$1S$				

### Espectros electrónicos de complejos

Para el complejo octaédrico  $d^3$   $[\text{Cr}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$  en solución acuosa, las **transiciones tienen distinta intensidad**



Se debe considerar la intensidad con la que el complejo se acopla con el campo electromagnético. La intensidad de una transición electrónica está determinada por el **momento dipolar de la transición** ( $\mu_{fi}$ ) desde un estado con una función de onda  $\Psi_i$  a un estado con una función de onda  $\Psi_f$

$$\mu_{fi} = \int \Psi_f \mu \Psi_i d\tau$$

$\mu$  es el momento dipolar eléctrico ( $-er$ ). La **intensidad de una transición** es proporcional al cuadrado de  $\mu_{fi}$ , **transición intensa**: acoplamiento intenso

**Reglas de selección:** rigen las transiciones electrónicas, reflejan las restricciones sobre los cambios de estado disponibles para un átomo o molécula. Una **transición prohibida** viola una regla de selección, tiene un **momento dipolar de transición** igual a cero. Algunas están **más prohibidas** que otras, las suposiciones bajo las que se calculó el  $\mu_{fi}$  no son válidas, por ejemplo el complejo tiene menor simetría que la que se asume.

**Regla de selección de Laporte:** las **únicas transiciones permitidas** son las que tienen un cambio de paridad:  $g \leftrightarrow u$  (*gerade a ungerade, ungerade a gerade*).

**Transiciones prohibidas:**  $g \leftrightarrow g, u \leftrightarrow u$

Como todos los orbitales  $d$  tienen simetría *gerade* en moléculas con centro de simetría todas las **transiciones  $d-d$  en complejos octaédricos** están formalmente **prohibidas**. Se pueden observar **transiciones vibrónicas débiles** por que las vibraciones asimétricas de un complejo octaédrico pueden destruir su centro de simetría. En general  $\epsilon$  para complejos  $ML_6$  varía de  $1-10^2 \text{ Lmol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$  por lo cual es probable observar transiciones  $d-d$  en una solución 0,10 M.

**Regla de selección de espín:** las **únicas transiciones permitidas** son las que no tienen un cambio del estado de espín, si  $\Delta S \neq 0$  son **transiciones prohibidas**. Se pueden observar bandas si el complejo presenta acoplamiento espín-órbita, más común en complejos de elementos de las series  $4d$  y  $5d$  (*efecto del átomo pesado*).

Distintos tipos de transiciones electrónicas observadas en complejos:

tipo de transición	$\epsilon(\text{L mol}^{-1} \text{ cm}^{-1})$	complejo representativo
prohibida por espín	<b><math>10^{-3}-1</math></b>	octaédricos $d^5$ como $[\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$
prohibida por Laporte		
permitida por espín	1-10	octaédricos, como $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$
prohibida por Laporte	$10-10^3$	plano cuadrados, como $[\text{PdCl}_4]^{2-}$
permitida por espín	<b><math>10^2-10^3</math></b>	bandas MLCT
permitida por Laporte	<b><math>10^3-10^6</math></b>	diversas bandas CT

**Diagramas de correlación:** en un complejo octaédrico los términos de los átomos libres se desdoblán en el campo de los ligandos de un complejo octaédrico y son representados en base a sus especies de simetría. En un átomo polieletrónico el término global  $S$  totalmente simétrico **se correlaciona** con el término totalmente simétrico  $A_{1g}$  del complejo octaédrico de simetría  $O_h$ .

**División de los términos  $d^n$  en un complejo octaédrico y número de estados**

$S \rightarrow A_{1g}$	<b>1</b>
$P \rightarrow T_{1g}$	<b>3</b>
$D \rightarrow E_g + T_{2g}$	<b>5</b>
$F \rightarrow A_{2g} + T_{1g} + T_{2g}$	<b>7</b>
$G \rightarrow A_{1g} + E_g + T_{1g} + T_{2g}$	<b>9</b>
$H \rightarrow E_g + T_{1g} + T_{1g} + T_{2g}$	<b>11</b>
$I \rightarrow A_{1g} + A_{2g} + E_g + T_{1g} + T_{2g} + T_{2g}$	<b>13</b>

**Energías de los términos:** responden de distinta manera a ligandos con una intensidad de campo cada vez mayor, las repulsiones interelectrónicas son difíciles de considerar pero se simplifican considerando los casos extremos. Se pueden construir distintos tipos de diagramas que presentan los estados basal y excitado de la misma multiplicidad en función de la fuerza del campo:

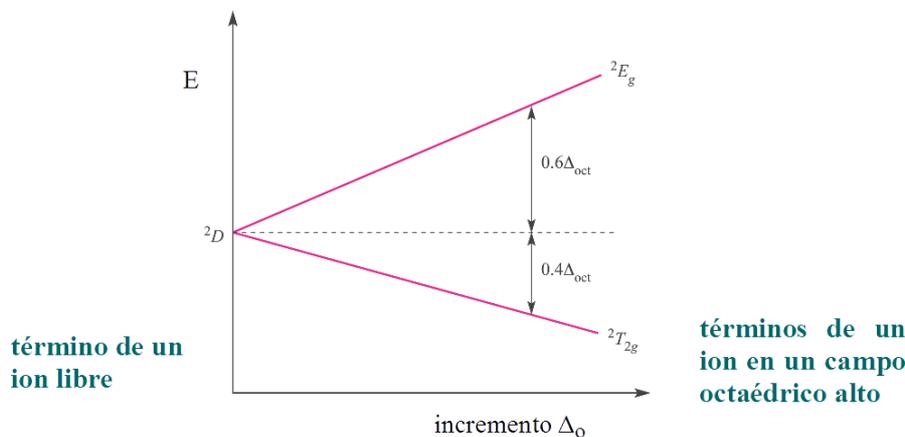
- **diagramas de correlación**

- **diagramas de Orgel:** se representan los campos octaédricos y tetraédricos simultáneamente

- **diagramas de Tanabe-Sugano:** la repulsión electrónica se expresa en términos de los parámetros de Radach  $B$  y  $C$

**Diagrama de correlación:** en el límite del **campo bajo**  $\Delta_o$  es tan débil que predominan las repulsiones electrón-electrón, los parámetros de Racah **B** y **C** describen este límite. En el límite del **campo alto** el campo de los ligandos es tan alto que las repulsiones electrón-electrón se pueden despreciar, las energías de los términos se pueden describir en base a  $\Delta_o$

Para una configuración  $d^1$ : el único término es  ${}^2D$ , como solo hay 1 electrón no hay repulsión electrónica, la separación entre los términos  ${}^2E_g$  y  ${}^2T_{2g}$  es la misma que la de los orbitales  $e_g$  y  $t_{2g}$  ( $\Delta_o$ ).



**Diagrama de Orgel:** existe relación entre las configuraciones  $d^1$  (posee un electrón) y  $d^9$  (posee un **hueco positivo**), el diagrama del desdoblamiento de  $d^9$  es inverso al diagrama de  $d^1$ . Para los iones  $d^1$ ,  $d^4$ ,  $d^6$  y  $d^9$  tetraédricos y octaédricos sólo es posible una transición electrónica:

$d^1$  y  $d^6$  octaédricos:  $E_g \leftarrow T_{2g}$

$d^4$  y  $d^9$  octaédricos:  $T_{2g} \leftarrow E_g$

$d^1$  y  $d^6$  tetraédricos:  $T_2 \leftarrow E$

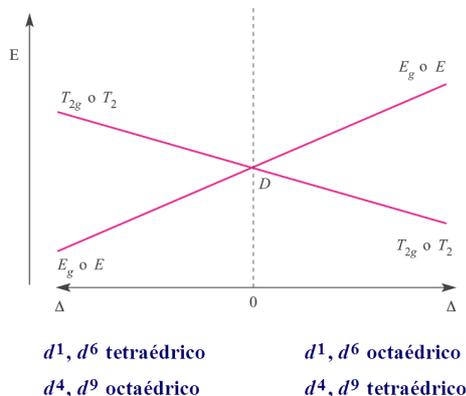
$d^4$  y  $d^9$  tetraédricos:  $E \leftarrow T_2$

La notación completa de la transición electrónica debe incluir la multiplicidad de espín, por ejemplo:

$d^1$  octaédrico:  ${}^2E_g \leftarrow {}^2T_{2g}$

$d^4$  octaédrico de alto espín:  ${}^5T_{2g} \leftarrow {}^5E_g$

Para los iones  $d^2$ ,  $d^3$ ,  $d^7$  y  $d^8$  tetraédricos y octaédricos: al aumentar la fuerza del campo las líneas que describen los términos  $T_{1g}(F)$ ,  $T_{1g}(P)$  o  $T_1(P)$  se curvan alejándose entre sí, hay interacción entre términos de la misma simetría.



$d^1, d^6$  tetraédrico

$d^1, d^6$  octaédrico

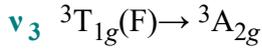
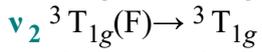
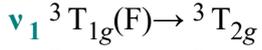
$d^4, d^9$  octaédrico

$d^4, d^9$  tetraédrico

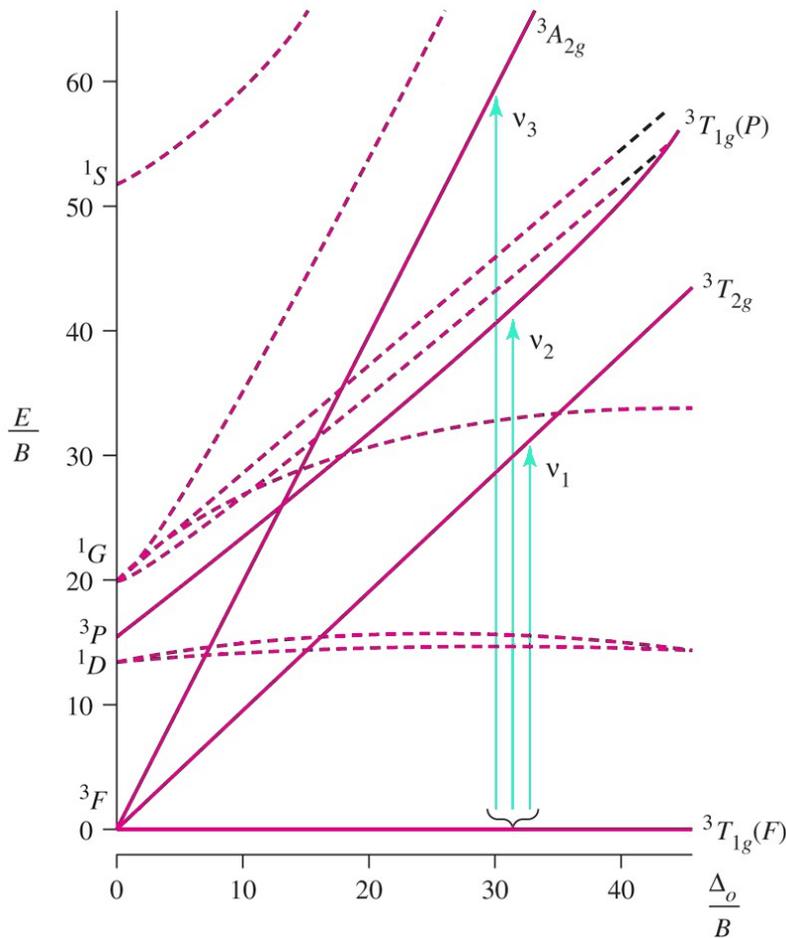
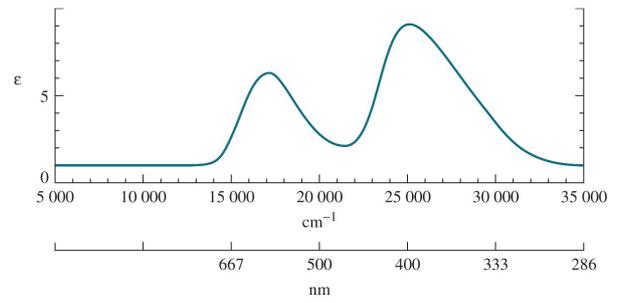
**Regla de no cruzamiento:** si un aumento en la intensidad del campo causa que los términos de campo bajo de la misma simetría se aproximen, estos dos no se entrecruzarán sino que se separarán uno de otro.

**Diagrama de Tanabe-Sugano:** tratamiento más avanzado para interpretar adecuadamente las características de los espectros electrónicos. La energía del estado fundamental se toma como cero para cualquier valor de campo, la energía de los demás términos y sus componentes se representa con respecto al término fundamental. Si se produce un cambio en el término fundamental al aumentar la fuerza del campo aparece una discontinuidad en el diagrama. La energía y la intensidad del campo se expresan en función del parámetro de Racah **B**.

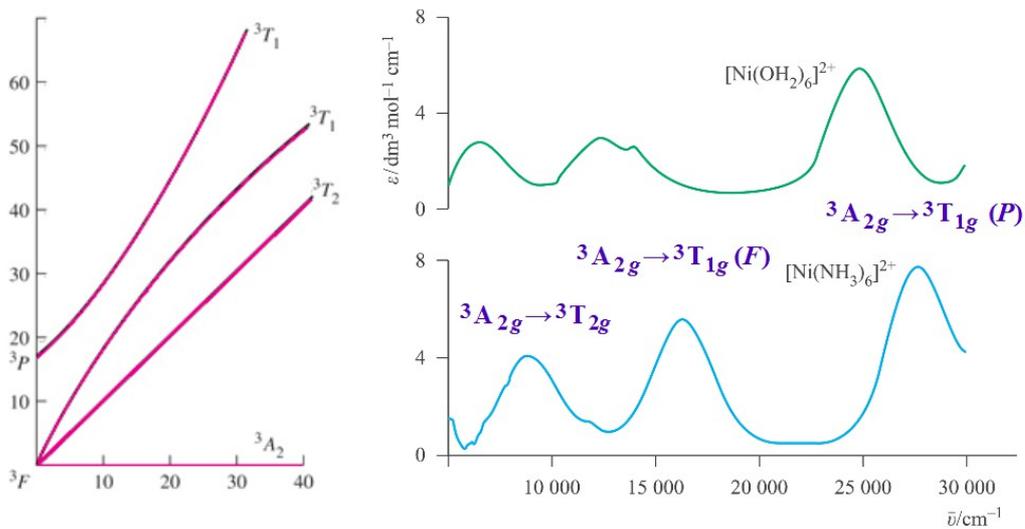
Para los iones  $d^2$  se esperan las transiciones:



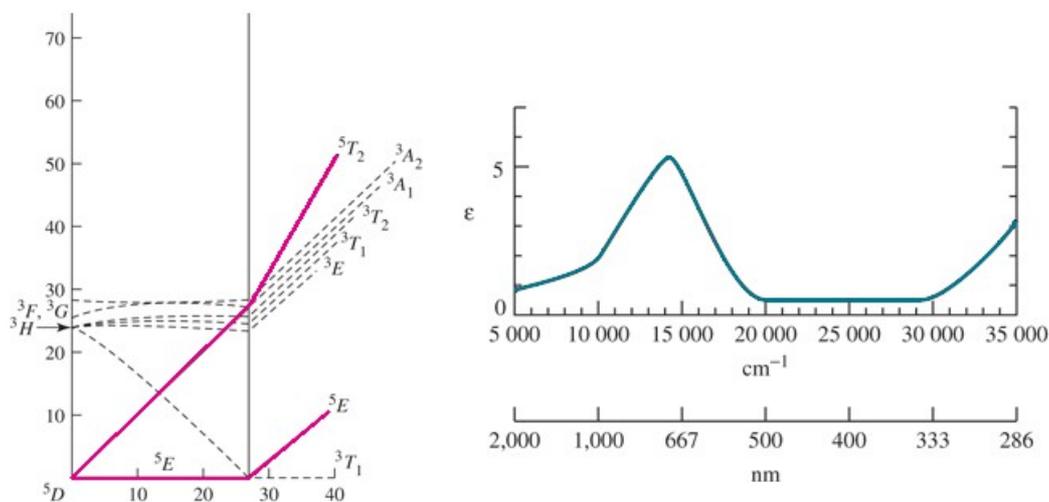
para  $[V(H_2O)_6]^{3+}$  se observa una banda a  $38000 \text{ cm}^{-1}$  en estado sólido.



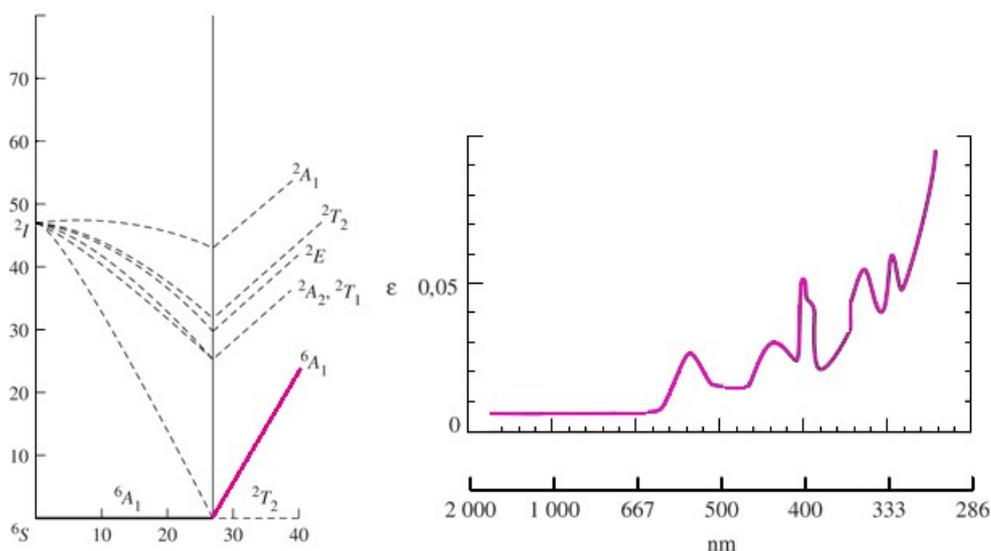
Para un complejo octaédrico de Ni(II)  $d^8$  en solución acuosa, concentraciones  $\approx 0,1 \text{ M}$



Para una configuración  $d^4$  (como  $\text{Mn}^{2+}$ ) se observa una discontinuidad correspondiente al pasaje de complejo de bajo a alto espín.



Para iones  $d^5$  (como  $\text{Mn}^{2+}$ ) de alto espín: todas las transiciones están prohibidas por espín, las transiciones  $d-d$  que se observan son entre el estado fundamental  ${}^6S$  y estados cuadruplete, las absorciones son muy débiles.



**Efecto nefelauxético (expansión de la nube electrónica):** existen evidencias de covalencia (se comparten electrones) en el enlace **M-L**. Las energías de apareamiento son más bajas en complejos que en iones  $M^{n+}$  gaseosos. La repulsión interelectrónica es menor en los complejos. El tamaño efectivo de los orbitales de **M** ha aumentado.

Para complejos con un ion **M** común el efecto de los **L** varía según una serie independiente del ion **M**:

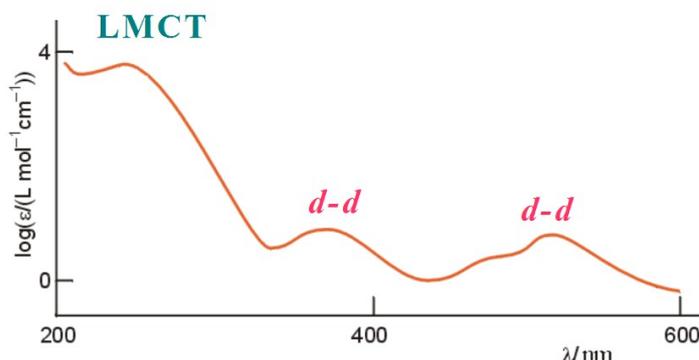


$\text{I}^-$  produce mayor reducción de las repulsiones electrónicas en el ion que un **L**  $\text{F}^-$ , lo cual es consistente con el mayor carácter covalente que tienen los complejos con  $\text{Br}^-$  comparados con sus complejos análogos de  $\text{F}^-$ .

Para iones **M** independiente de los **L**:



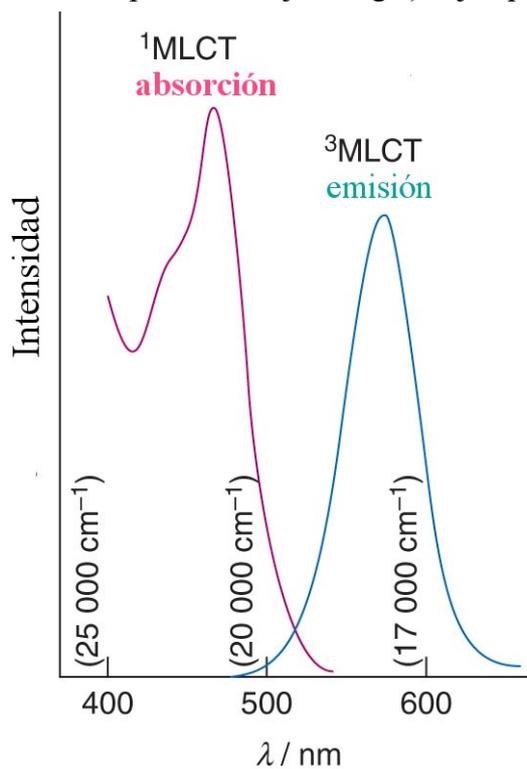
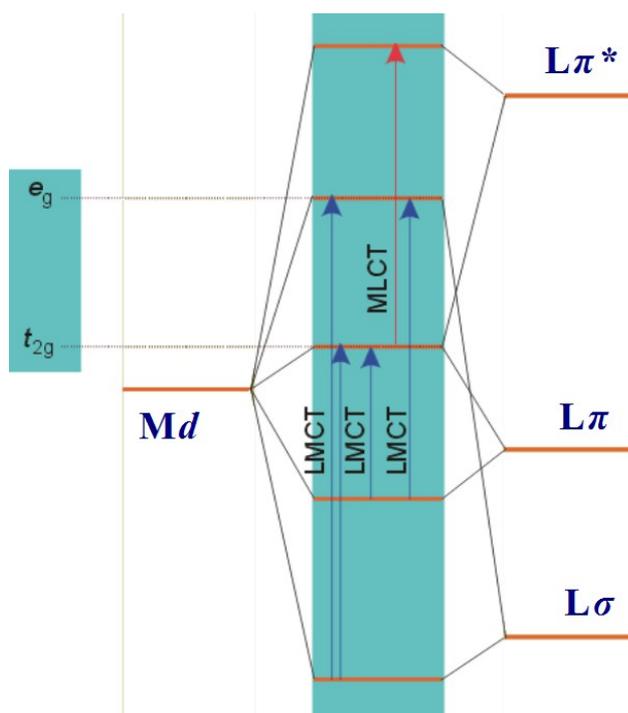
**Bandas de transferencia de carga (CT):** algunas bandas tienen intensidades mucho mayores que las correspondientes a las transiciones *d-d* del campo de los ligandos y que presentan *solvatocromismo*.



Se originan debido al movimiento de los electrones entre los orbitales que tienen un carácter predominantemente de **L** y orbitales que tienen predominantemente carácter de **M**.

- **banda de transferencia de carga del ligando al metal (LMCT):** la migración del electrón ocurre del **L** (contienen electrones no enlazantes) al **M** (en estado de oxidación alto), ejemplo  $\text{MnO}_4^-$

- **banda de transferencia de carga del metal al ligando (MLCT):** la migración del electrón ocurre de **M** (en estado de oxidación bajo) al **L** (contienen orbitales aceptores de baja energía), ejemplo  $[\text{Ru}(\text{bipy})_3]^{2+}$

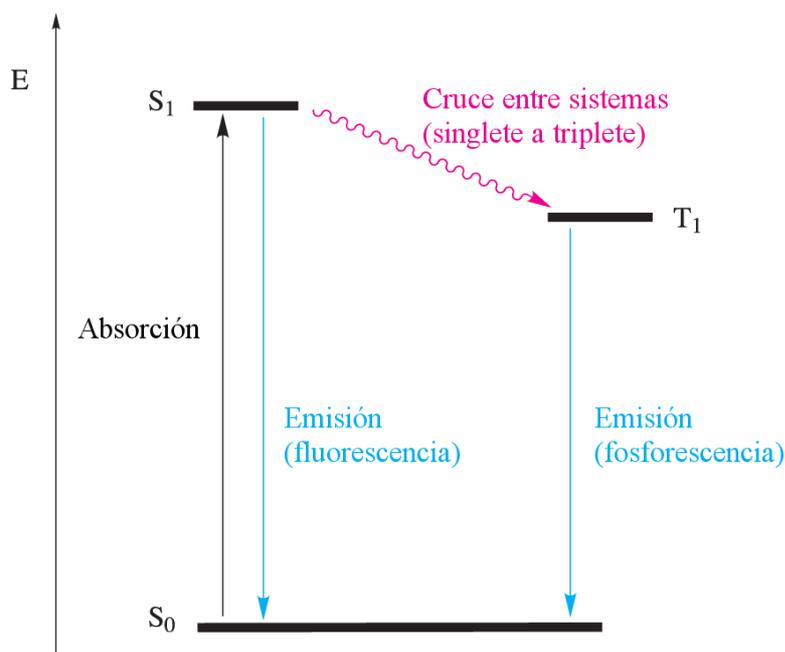


Absorción y emisión de  $[\text{Ru}(\text{bipy})_3]^{2+}$

**Luminiscencia:** algunos compuestos de coordinación emiten radiación después de ser electrónicamente excitados. La luminiscencia compete con los decaimientos no radiativos y de acuerdo a los estados involucrados puede ser fluorescencia (decaimiento radiativo desde un estado electrónicamente excitado que posee la misma multiplicidad del estado fundamental) y fosforescencia (decaimiento desde un estado de diferente multiplicidad, es un proceso prohibido por espín y por lo tanto, lento).

## Diagrama de Jablonski

Describe las transiciones responsables de la absorción y luminiscencia.



## Propiedades magnéticas

Se puede identificar la configuración en estado fundamental de un complejo a partir de mediciones magnéticas para determinar el número de **espines desapareados**. Cuando el **M** es parte de un complejo cualquier momento angular orbital normalmente se extingue como resultado de las interacciones entre los electrones con su entorno no esférico, se mantiene el momento angular del espín: **paramagnetismo exclusivo del espín**. Los datos obtenidos sirven para distinguir entre un complejo de alto y de bajo espín.

**momento magnético exclusivo del espín** ( $\mu$ ) de un complejo con número cuántico de espín total S:

$$\mu = 2\sqrt{S(S+1)}\mu_B \quad \text{donde } \mu_B: \text{ magnetón de Bohr } (9,274 \times 10^{-24} \text{ J/T}).$$

La suposición de que la contribución es exclusiva del espín puede fallar para complejos con orbitales vacíos o semilenos con una energía similar a la de los orbitales ocupados por los electrones desapareados y con una simetría apropiada:  $d^5$  de bajo espín,  $3d^6$  y  $3d^7$  de alto espín.

**Magnetometría:** se puede determinar la respuesta de una muestra a la aplicación de un campo magnético empleando:

- **balanza de Gouy:** mide el cambio en el peso aparente de una muestra
- **dispositivo superconductor de interferencia cuántica (SQUID):** se mide la corriente que fluye por una espiral de superconductores en un campo magnético

## Momentos magnéticos de espines para configuraciones $t_{2g}^x e_g^y$

	<b>N</b>	<b>S</b>	<b><math>\mu/\mu_B</math> calculado</b>	<b><math>\mu/\mu_B</math> experimental</b>
Ti <sup>3+</sup>	1	½	1,73	1,7-1,8
V <sup>3+</sup>	2	1	2,83	2,7-2,9
Cr <sup>3+</sup>	3	3/2	3,87	3,8
Mn <sup>3+</sup>	4	2	4,90	4,8-4,9
Fe <sup>3+</sup>	5	5/2	5,92	5,9