UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS

**CONTRIBUIÇÃO AO ESTUDO DA ESTRUTURA DE
COMPLEXOS DE FOSFINÓXIDOS COM COBALTO (II)**

REGINA HELENA DE ALMEIDA SANTOS

Trabalho apresentado ao Instituto de Física
e Química de São Carlos, USP, para ob-
tenção do título de Doutor em Ciências
(Física Aplicada e Ciência dos Materiais).

Orientadora: Profa. Dra. Y. P. Mascarenhas

DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

1979

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS

**CONTRIBUIÇÃO AO ESTUDO DA ESTRUTURA DE
COMPLEXOS DE FOSFINÓXIDOS COM COBALTO (II)**

REGINA HELENA DE ALMEIDA SANTOS

Trabalho apresentado ao Instituto de Física
e Química de São Carlos, USP, para ob-
tenção do título de Doutor em Ciências
(Física Aplicada e Ciência dos Materiais).

Orientadora: Profa. Dra. Y. P. Mascarenhas

DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

1979

Ao Paulo

Ao Ary

A Darcy

Este trabalho contou com o apoio financeiro da CAPES, CNPq, FAPESP, BNDE, BID e FINEP.

ÍNDICE

LISTA DE ILUSTRAÇÕES.....	I
LISTA DE TABELAS.....	II
AGRADECIMENTOS.....	III
RESUMO.....	IV
ABSTRACT.....	V
 INTRODUÇÃO.....	 1
OBJETIVOS.....	5
CAPÍTULO I - Fundamentos Teóricos.....	7
 CAPÍTULO II- Resolução e refinamento das estruturas de complexos de benzil e fenil fosfinóxido com cloreto de Cobalto(II).....	 15
 CONCLUSÕES.....	 51
 APÊNDICE 1 - Expressões para o cálculo do fator de estrutura ($F(hk^2)$) e da densidade eletrônica ($\rho(xyz)$)....	 61
A.1 - Dicloro bis(tribenzilfosfinóxido) Cobalto(II) Grupo espacial $P2_12_12_1$	61
A.2 - Dicloro bis(benzildifenilfosfinóxido) Cobalto(II)- Grupo espacial $C2/c$	62
A.3 - Dicloro bis(benzildifenilfosfinóxido) Cobalto(II)- Grupo espacial $P2_1/c$	62
A.4 - Dicloro bis(trifenilfosfinóxido) Cobalto(II) Grupo espacial $Fdd2$	63
 APÊNDICE 2 - Transformação dos parâmetros cristalográficos decorrente de uma mudança de base.....	 64
 BIBLIOGRAFIA.....	 140

Figura 12- Projeção estereoscópica do empacotamento molecular na cela unitária do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$	77
Figura 13- Representação ORTEP da molécula de $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ com os átomos identificados.....	77
Figura 14- Projeção estereoscópica da molécula de $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ com representação dos elipsóides de vibração térmica.....	78

I

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

- Figura 1 - Representação ORTEP da molécula de $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ com os átomos identificados..... 70
- Figura 2 - Projeção estereoscópica do empacotamento molecular na cela unitária do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ 70
- Figura 3 - Gráfico de Wilson para a determinação dos fatores de escala e temperatura para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$ 71
- Figura 4 - Representação ORTEP da molécula de $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$ com os átomos identificados..... 72
- Figura 5 - Projeção estereoscópica da molécula de $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$ com representação dos elipsóides de vibração térmica. 73
- Figura 6 - Projeção estereoscópica do empacotamento molecular na cela unitária do $\text{CoCl}_2 \cdot \text{dbfpo}$ 73
- Figura 7 - Gráfico de Wilson para a determinação dos fatores de escala e temperatura para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$ 74
- Figura 8 - Projeção estereoscópica do empacotamento molecular na cela unitária do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$ 75
- Figura 9 - Representação ORTEP da molécula de $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$ com os átomos identificados..... 75
- Figura 10- Projeção estereoscópica da molécula de $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$ com representação dos elipsóides de vibração térmica. 76
- Figura 11- Gráfico de Wilson para a determinação dos fatores de escala e temperatura para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ 76

Figura 12- Projeção estereoscópica do empacotamento molecular na cela unitária do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$	77
Figura 13- Representação ORTEP da molécula de $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ com os átomos identificados.....	77
Figura 14- Projeção estereoscópica da molécula de $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ com representação dos elipsóides de vibração térmica.....	78

II

LISTA DE TABELAS

Tabela I - Parâmetros posicionais e de vibração térmica anisotrópica e respectivos desvios padrão ($\times 10^5$) do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$	79
Tabela II- Parâmetros posicionais e de vibração térmica isotrópica ($\times 10^5$) dos hidrogênios do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ e respectivos desvios padrão.....	80
Tabela III- Distâncias e ângulos intramoleculares com seus respectivos desvios padrão para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$	81
Tabela IV- Equações dos planos dos radicais benzílicos, coordenadas ortogonais absolutas, desvios padrão e distância dos átomos aos planos no $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$...	82
Tabela V - Ângulos diedros entre os planos dos anéis benzílicos para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$	83
Tabela VI- Fatores de estrutura observados e calculados finais para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$	84
Tabela VII- Análise da configuração em torno do íon Co(II) no $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$	92
Tabela VIII-Distribuição estatística dos fatores de estrutura normalizados para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$	93
Tabela IX- Figuras de mérito para os conjuntos de fases calculados pelo MULTAN para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$	93
Tabela X - Parâmetros posicionais e de vibração térmica e respectivos desvios padrão ($\times 10^5$) do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$	94

Tabela XI - Análise da configuração em torno do íon Co(II) no $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$	95
Tabela XII- Distâncias e ângulos intramoleculares e seus respectivos desvios padrão para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$	96
Tabela XIII- Equações dos planos dos radicais benzílicos e fenílicos, coordenadas ortogonais absolutas, desvios padrão e distâncias dos átomos aos planos e ângulos diedros entre os planos no $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$	97
Tabela XIV- Fatores de estrutura observados e calculados finais para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$	98
Tabela XV- Distribuição estatística dos fatores de estrutura normalizados para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$	105
Tabela XVI- Figuras de mérito para os conjuntos de fases calculados pelo MULTAN para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$	105
Tabela XVII- Parâmetros posicionais e de vibração térmica e seus respectivos desvios padrão ($\times 10^5$) do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$.	106
Tabela XVIII- Fatores de estrutura observados e calculados finais para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$	108
Tabela XIX - Análise da configuração em torno do íon Co(II) no $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$	121
Tabela XX - Distâncias e ângulos intramoleculares com seus respectivos desvios padrão para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$	122
Tabela XXI- Equações dos planos dos radicais benzílicos e fenílicos, coordenadas ortogonais absolutas, desvios pa	

drão, distâncias dos átomos aos planos e ângulos
diedros entre os planos no $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$ 123

Tabela XXII- Distribuição estatística dos fatores de estrutura
normalizados para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ no grupo espacial
 C_2 124

Tabela XXIII- Figuras de mérito para os conjuntos de fases cal-
culados pelo MULTAN para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ no grupo
espacial C_2 125

Tabela XXIV- Parâmetros posicionais de vibração térmica e seus
respectivos desvios padrão ($\times 10^5$) do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$
no grupo espacial C_2 126

Tabela XXV- Parâmetros posicionais e de vibração térmica e seus
respectivos desvios padrão do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ no gru -
po espacial Fdd_2 128

Tabela XXVI- Distâncias e ângulos intramoleculares com seus res-
pectivos desvios padrão para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ no gru-
po espacial Fdd_2 129

Tabela XXVII- Análise da configuração em torno do íon Co(II) no
 $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ no grupo espacial Fdd_2 130

Tabela XXVIII- Equações dos planos dos radicais fenílicos, coor-
denadas ortogonais absolutas, desvios padrão, dis-
tância dos átomos aos planos e ângulos diedros en-
tre os planos no $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ 131

Tabela XXIX- Fatores de estrutura observados e calculados fi -
nais para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ no grupo espacial Fdd_2 132

Tabela XXX- Distâncias e ângulos entre os átomos centrais.... 138

Tabela XXXI- Ângulos diedros centrais..... 139

III

AGRADECIMENTOS

Durante o desenvolvimento deste trabalho muitas pessoas e instituições colaboraram direta ou indiretamente.

Em particular quero agradecer aos Departamentos do Instituto de Física e Química de São Carlos que compartilham o Laboratório de Cristalografia.

Quero agradecer principalmente

ã Profa.Dra.Yvonne Primerano Mascarenhas, minha orientadora, pelo apoio e confiança demonstrados desde o meu ingresso na pós-graduação;

ao Prof.Dr.Johannes Rudiger Lechat pelo incentivo e pelo interesse demonstrado nas discussões sempre valiosas;

ao Prof.Dr.Antonio Carlos Massabni por ter fornecido as amostras e sugerido o problema abordado neste trabalho e pelas discussões na parte química envolvida;

ã Profa.Dra.Maria Mabel M. de Medeiros Rodrigues pela amizade e incentivo sempre presentes;

ao Prof.Dr.Eduardo Ernesto Castellano pelas discussões e ajuda na parte matemática envolvida;

ao Prof.Jan Franz W.Slaets sempre disposto a auxiliar nas dificuldades de funcionamento do difratômetro CAD-4 e do computador PDP11/45;

ao Prof.Dr.Koychi Tomita, importante elemento de ligação entre o Laboratório de Cristalografia e o Departamento de Química Inorgânica do Instituto de Química de Araraquara-UNESP, pelas constantes gentilezas no transporte de informações e de material de trabalho;

as minhas amigas, companheiras de sala, Profa.Regina Helena P.Francisco, Prof.Ana Maria G.Dias Rodrigues, Bel.Maria Teresa do P.Gambardella e Sandra Helena Pulcinelli pela constante boa vontade em colaborar nos mais diversos aspectos;

aos Srs.Carlos Alberto Trombella, Valdeci Massaro e Valdir Melchior, técnicos do Departamento de Física e Ciências dos Materiais, pela eficiência e boa vontade de colaboração;

aos Srs.Carlos Alberto De Simone e Paulo Roberto S.Beatrice pelos desenhos;

ã Sra.Loreni Bastos Pereira Ruas pela datilografia.

IV
RESUMO

Foram determinadas as estruturas cristalinas e moleculares, por método de difração de raios-X de monocristais, da série de quatro complexos de cloreto de Cobalto(II) com tri-benzilfosfinóxido, dibenzilfenilfosfinóxido), benzildifenilfosfinóxido e trifenilfosfinóxido.

Os dados cristalinos são:

Dicloro bis(tribenzilfosfinóxido) Cobalto(II), $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$, $\text{CoCl}_2[(\text{C}_7\text{H}_7)_3\text{PO}]_2$; sistema cristalino: ortorrômbico; grupo espacial: $P2_12_12_1$; $a=15,133(1)$, $b=15,905(1)$, $c=16,493(1)\text{\AA}$, $V=3954\text{\AA}^3$; $d_c=1,289(2)\text{g.cm}^{-3}$; $d_o=1,29(1)\text{g.cm}^{-3}$.

Dicloro bis(dibenzilfenilfosfinóxido) Cobalto(II), $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$, $\text{CoCl}_2[(\text{C}_7\text{H}_7)_2(\text{C}_6\text{H}_5)\text{PO}]_2$; sistema cristalino: monoclinico; grupo espacial: $C2/c$; $a=18,187(9)$, $b=10,998(7)$, $c=18,954(3)\text{\AA}$, $\beta=96,12^\circ(4)$, $V=3769\text{\AA}^3$; $d_c=1,314(3)\text{g.cm}^{-3}$; $d_o=1,33(1)\text{g.cm}^{-3}$.

Dicloro bis(benzildifenilfosfinóxido) Cobalto(II), $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$, $\text{CoCl}_2[(\text{C}_7\text{H}_7)(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{PO}]_2$; sistema cristalino: monoclinico; grupo espacial: $P2_1/c$; $a=10,217(2)$, $b=16,776(2)$, $c=21,920(3)\text{\AA}$, $\beta=112,15^\circ(3)$, $V=3494\text{\AA}^3$; $d_c=1,364(3)\text{g.cm}^{-3}$; $d_o=1,37(1)\text{g.cm}^{-3}$.

Dicloro bis(trifenilfosfinóxido) Cobalto(II), $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$, $\text{CoCl}_2[(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{PO}]_2$; sistema cristalino: ortorrômbico; grupo espacial: $Fdd2$; $a=20,730(2)$, $b=32,947(6)$, $c=9,761(2)\text{\AA}$, $V=6666\text{\AA}^3$; $d_c=1,368(1)\text{g.cm}^{-3}$; $d_o=1,37(1)\text{g.cm}^{-3}$.

As intensidades das reflexões foram medidas por

difratometria automática. As estruturas foram resolvidas pelo Método Direto e refinadas por mínimos quadrados com matriz completa.

As distâncias e ângulos mais relevantes para os quatro compostos são dadas na ordem $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$; $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$; $\text{CoCl}_2 \cdot \text{bdfpo}$; $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$, para Co-O: 1,937(7) e 1,920(6); 1,974(3); 1,974(3) e 1,977(3); 1,940(10) Å, para Co-Cl : 2,255(3) e 2,249(3); 2,249(2); 2,243(2) e 2,249(2); 2,243(4) Å, para O-P: 1,505(7) e 1,547(7); 1,529(4); 1,513(4) e 1,501(4), 1,505(10) Å, para Cl-Co-Cl: 113,01(14)°; 120,5(1)°; 121,78(7)°; 111,55(28)°, para O-Co-O : 104,98(30)°; 103,7(2)°; 100,04(16)°; 100,25(67)°, para Co-O-P: 153,0(8)° e 176,0(8); 135,2(2)°; 140,80(26)° e 136,43(24)° ; 155,21(73)°.

Nas quatro estruturas o Cobalto(II) apresenta-se tetraedricamente coordenado. Uma comparação dos parâmetros moleculares destas quatro estruturas entre si e com dados da literatura, permite concluir que o Cobalto(II) exerce predominantemente um efeito de orientação dos ligantes orgânicos. A estrutura molecular dos complexos $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$ e $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ possui eixo 2 de simetria enquanto que nos $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$ e $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ a coordenação em torno do Cobalto(II) é suficientemente distorcida para que essa simetria seja perdida. Isto permite explicar os espectros de I.V. destes complexos no que tange ao desdobramento das respectivas frequências de estiramento da ligação P-O.

Em todos os complexos o empacotamento cristalino consiste de um arranjo discreto das moléculas.

V
ABSTRACT

The crystal and molecular structures of a series of four complexes of Cobalt(II) Chloride with tribenzylphosphine oxide, dibenzylphenylphosphine oxide, benzyldiphenylphosphine oxide and triphenylphosphine oxide were determined by single crystal X-ray diffraction.

The crystal data are:

Bis(tribenzylphosphine oxide) dichloro Cobalt(II), $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$, $\text{CoCl}_2 | (\text{C}_7\text{H}_7)_3\text{PO} |_2$; crystal system: orthorhombic ; space group $\text{P}2_12_12_1$, $a=15.133(1)$, $b=15.905(1)$, $c=16.493(1)\text{\AA}$, $V=3954\text{\AA}^3$; $d_c=1.289(2)\text{g.cm}^{-3}$; $d_o=1.29(1)\text{g.cm}^{-3}$.

Bis(dibenzylphenylphosphine oxide) dichloro Cobalt(II), $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$, $\text{CoCl}_2 | (\text{C}_7\text{H}_7)_2(\text{C}_6\text{H}_5)\text{PO} |_2$; crystal system: monoclinic; space group: $\text{C}2/c$; $a=18.187(9)$, $b=10.998(7)$, $c=18.954(3)\text{\AA}$, $\beta=96.12^\circ(4)$, $V=3769\text{\AA}^3$, $d_c=1.314(3)\text{g.cm}^{-3}$, $d_o=1.33(1)\text{g.cm}^{-3}$.

Bis(benzyldiphenylphosphine oxide) dichloro Cobalt(II), $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$, $\text{CoCl}_2 | (\text{C}_7\text{H}_7)(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{PO} |_2$; crystal system: monoclinic; space group: $\text{P}2_1/c$; $a=10.217(2)$, $b=16.776(2)$, $c=21.920(3)\text{\AA}$, $\beta=112.15^\circ(3)$, $V=3494\text{\AA}^3$; $d_c=1.364(3)\text{g.cm}^{-3}$; $d_o=1.370(1)\text{g.cm}^{-3}$.

Bis(triphenylphosphine oxide) dichloro Cobalt(II), $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$, $\text{CoCl}_2 | (\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{PO} |_2$; crystal system: orthorhombic ; space group: $\text{Fdd}2$; $a=20.730(2)$, $b=32.947(6)$, $c=9.761(2)\text{\AA}$, $V=6666\text{\AA}^3$; $d_c=1.368(1)\text{g.cm}^{-3}$; $d_o=1.37(1)\text{g.cm}^{-3}$.

The intensities of the reflexion were measured by automatic diffractometry. The structures were solved by Direct Method, and refined by full matrix least-squares.

The relevant distances and angles for the four compounds are given in order $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$; $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$; $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$; $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$, for Co-O: 1.937(7) and 1.920(6); 1.974(3); 1.974(3) and 1.977(3); 1.940(10) Å, for Co-Cl: 2.255(3) and 2.249(3); 2.249(2); 2.243(2) and 2.249(2); 2.243(4) Å, for O-P: 1.505(7) and 1.517(7); 1.529(4); 1.513(4) and 1.501(4); 1.505(10) Å, for Cl-Co-Cl: 113.01(14)°; 120.5(1)°; 121.78(7)°; 111.55(28)°, for O-Co-O: 104.98(30)°; 103.7(2)°; 100.04(16)°; 100.25(67)°, for Co-O-P: 153.0(8)° and 176.0(8); 135.2(2)°; 140.80(26)° and 136.43(24)°; 155.21(73)°.

In the four structures the Cobalt(II) are tetrahedrally coordinated. A comparison among the molecular parameters of these four structures, and with other data from the literature allows us to conclude that the Cobalt(II) orients the organic ligands.

A two fold axis is presented by the molecular structure of the complexes $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$ and $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ while in $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$ and $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ the coordination around the Cobalt(II) is so distorted that this symmetry axis is lost. This allows us to explain the i.r. spectra of this complexes in the region associated to the splitting of the P-O stretching band.

In all complexes the crystal packing consists of an arrangement of discrete molecules.

INTRODUÇÃO

Os compostos de coordenação entre sais de Cobalto, Cobre, Niquel, Manganês e outros, com fosfinóxidos como ligantes tem sido intensamente estudados tanto sob o aspecto de química em solução quanto em estado sólido. Uma extensa compilação bibliográfica feita por A.C.Massabni em sua tese de doutoramento⁽¹⁾, mostrou que desde 1880 já existia interesse dos químicos em estudá-los de forma sistemática.

A partir do advento das técnicas cristalográficas de difração por raios-X para determinação de estruturas cristalinas houve um grande desenvolvimento do estudo sistemático destes complexos.

Embora os complexos de trifenilfosfinóxido com metais tenham sido bastante analisados cristalograficamente, o mesmo não acontece com os complexos envolvendo radicais benzílicos no ligante fosforilado.

Para a realização deste trabalho foi escolhida uma série de complexos de Cloreto de Cobalto(II) com trifenilfosfinóxido, substituindo-se de cada vez um fenil por benzil resultando quatro complexos ou seja, Dicloro bis (trifenilfosfinóxido) Cobalto(II), Dicloro bis (benzildifenilfosfinóxido) Cobalto(II), Dicloro bis (dibenzilfenilfosfinóxido) Cobalto(II) e Dicloro bis (tribenzilfosfinóxido) Cobalto (II).

Esta série é proveniente do conjunto estudado por A.C.Massabni, que em seu trabalho apresenta resultados de estudos físico-químicos.

Todos os 4 complexos, de cor azul, através dos resultados dos estudos feitos⁽¹⁾, mostraram evidências de Cobalto tetraedricamente coordenado, com dois cloros e dois oxigênios na esfera de coordenação.

Considerações sobre a eletronegatividade dos grupos benzílico e fenílico⁽²⁾, levaram ao estabelecimento de uma ordem decrescente de basicidade, partindo do tribenzilfosfinóxido até o trifenilfosfinóxido. De acordo com essa ordem, o comprimento de ligação Co-O deveria diminuir para os complexos contendo benzil enquanto que a ligação P-O deveria ter seu comprimento aumentado.

Sheka e col.⁽²⁾ mostraram que há uma relação linear entre as somas das eletronegatividades dos substituintes e as absorptividades molares de complexos de vários fosfinóxidos, inclusive do benzildifenilfosfinóxido e trifenilfosfinóxido com cloreto de Cobalto(II). Baseados nas conclusões desse trabalho esperava-se que a absorptividade molar (ϵ) calculada por Massabni⁽¹⁾ através da absorbância no centro de gravidade da banda ν_3 do espectro de infravermelho próximo dos complexos em dicloroetano, seguisse a mesma ordem decrescente de basicidade. Entretanto os resultados obtidos apresentaram ordem inversa decrescendo do trifenilfosfinóxido para o tribenzilfosfinóxido.

A natureza da ligação Metal-Oxigênio é um ponto controvertido. Segundo De Bolster⁽³⁾ e também Joesten e col.⁽⁴⁾ o íon metálico tem apenas o papel de orientar os ligantes e a ligação Metal-Oxigênio é de natureza eletrostática.

A inversão da ordem na absortividade molar, encontrada por Massabni, levou-o a diversas considerações na tentativa de explicá-la. Uma delas é a hipótese da existência de pontes de hidrogênio intramoleculares envolvendo os hidrogênios do radical metileno do benzil e o oxigênio do fosfinóxido. Esta ligação hidrogênio baixaria a densidade eletrônica do oxigênio, levando à diminuição da absortividade molar quanto maior fosse o número de radicais benzílicos no ligante.

Outra hipótese, levando em consideração as conclusões de De Bolster⁽³⁾, seria os efeitos estéricos maiores dos ligantes benzílicos com relação aos fenílicos, produzindo uma conformação tal que o resultado final seria a inversão da ordem de basicidade.

Estes problemas, associados a outros, somente solúveis por métodos cristalográficos, tais como verificação da orientação dos ligantes, influência dos diferentes grupos no ligante sobre a esfera de coordenação do Cobalto levaram à escolha desta série completa.

Sendo todos os complexos hipoteticamente de Cobalto tetraédrico com 2 cloros e 2 oxigênios coordenados, a molécula deveria admitir a existência de eixo de ordem 2 molecular, e is

to segundo Bertrand e col.⁽⁵⁾ deve influir no espectro de infra - vermelho, na região da banda de vibração P-0. Isto é, se a molécula fosse simétrica deveria aparecer uma banda única, enquanto que a falta de simetria deveria dar banda múltipla. Essa hipótese também foi analisada nesse trabalho, através do comportamento desta série.

OBJETIVOS

O presente trabalho visa a determinação das estruturas molecular e cristalina da série de quatro compostos de coordenação, Dicloro bis(trifenilfosfinóxido) Cobalto(II), Dicloro bis(benzildifenilfosfinóxido) Cobalto(II), Dicloro bis(dibenzilfenilfosfinóxido) Cobalto(II) e Dicloro bis(tribenzilfosfinóxido) Cobalto(II), com o objetivo de verificar várias características estereoquímicas tais como:

- 1) A coordenação do íon Co^{+2} indicada como possivelmente tetraédrica por métodos espectroscópicos e de momento magnético;
- 2) A influência dos grupos fenílicos e benzílicos e combinação de ambos no mesmo ligante, sobre a distorção da geometria de coordenação do íon Co^{+2} e sobre o comprimento de ligação P-O;
- 3) A orientação dos ligantes com relação ao íon central e possível influência deste sobre o comprimento de ligação Co-O;
- 4) A possibilidade de formação de pontes de hidrogênio intramoleculares envolvendo o hidrogênio do grupo metileno do benzil e o oxigênio do grupo fosforila, apontada como possível responsável pela inversão da ordem de basicidade observada para esses complexos, com relação a ordem esperada;

-6-

5) O empacotamento molecular no cristal, visando o relacionamento da simetria molecular à simetria cristalina.

CAPÍTULO I FUNDAMENTOS TEÓRICOS

Considerando que as estruturas descritas neste trbalho foram resolvidas através de um mesmo procedimento básico, a apresenta-se neste Capítulo um resumo dos métodos envolvidos.

Redução dos dados

Após a medida das intensidades das reflexões por difratometria de raios-X, existe a necessidade da obtenção dos môdulos dos fatores de estrutura.

Ao cálculo dos módulos dos fatores de estrutura chama-se redução de dados⁽⁶⁾.

Essa redução de dados leva em consideração dois efeitos principais:

a) efeito de polarização⁽⁷⁾, que aparece pelo fato do feixe incidente proveniente do tubo não ser polarizado .

O efeito de polarização tem uma complicação adicional pelo fato do feixe incidente sofrer uma modificação extra na sua polarização, ao refletir no monocromador no processo de monocromatização⁽⁸⁾ da radiação.

b) efeito de Lorentz⁽⁷⁾ que leva em conta o fato dos pontos do retículo recíproco atravessarem a esfera de Ewald com diferentes velocidades.

Ambos os efeitos podem ser introduzidos como fatores multiplicativos que dependem unicamente do ângulo θ de Bragg

(θ_β) .

As fórmulas relevantes são:

$$I_h = K L_p |F_h|^2$$

onde:

I_h = intensidade integrada do feixe difratado

K = constante de proporcionalidade, tomada como u
nitária

L = fator de Lorentz

p = fator de polarização

F_h = fator de estrutura

$$L = \frac{1}{\sin 2\theta_\beta}$$

O fator de polarização para a geometria do difratômetro CAD-4 usado na medida das intensidades dos feixes difratados é dado por:

$$p = \left[(\text{PERF}) \frac{\cos^2 2\theta_m + \cos^2 2\theta_\beta}{1 + \cos^2 2\theta_m} + (1 - \text{PERF}) \frac{\cos 2\theta_m + \cos^2 2\theta_\beta}{1 + \cos 2\theta_m} \right]$$

onde:

PERF = fator de mosaicidade do monocromador e

θ_m = ângulo de Bragg do monocromador

Determinação dos fatores de escala e de temperatura isotrópico

As medidas das intensidades das reflexões são feitas numa escala relativa, portanto os fatores de estrutura também estão em escala relativa.

Como as equações probabilísticas utilizadas na resolução do problema da fase requerem o uso dos fatores de estrutura medidos em número de elétrons, é necessário encontrar o fator multiplicativo que permita a conversão à escala absoluta.

Wilson⁽⁶⁾ estabeleceu um método gráfico, que possui o seu nome, que permite o encontro simultâneo do fator de escala e do fator de temperatura isotrópico médio.

Obtidos os fatores de escala e de temperatura, passou-se à resolução do problema da fase⁽⁷⁾.

Resolução do problema da fase

O método escolhido para resolução das estruturas e portanto para resolução do problema da fase foi o Método Direto⁽⁹⁾ através do sistema de programas MULTAN⁽¹⁰⁾ (método da aplicação múltipla da fórmula da tangente). Para aplicação do Método Direto foi processada a normalização dos fatores de estrutura⁽¹¹⁾. O Método Direto utiliza para determinação da fase dos fatores de estrutura, relações probabilísticas que assumem os átomos como pon-

tuais, normalizando em termos de relação do número de elétrons de forma tal que $\langle E_h^2 \rangle_h$ seja igual a 1 onde E_h representa o fator de estrutura normalizado.

Através da aplicação do MULTAN chega-se a determinação de conjuntos de fases prováveis, para os quais são avaliadas figuras de mérito⁽⁹⁾ que permitem a escolha do melhor conjunto.

Com esses conjuntos de fases é possível calcular-se a densidade eletrônica⁽⁷⁾ para cada conjunto. Na realidade, escolhe-se o melhor conjunto de fases e com este calcula-se o mapa de $E^{(7)}$ que nada mais é que a síntese de Fourier usando os fatores de estrutura normalizados (E_h) como coeficientes da série.

Nestes mapas de E , se o cálculo das fases está correto, devem ser encontradas as posições dos átomos.

Nas estruturas resolvidas foram localizados somente os átomos de maior número de elétrons, e a posição dos outros foi localizada, após o cálculo dos fatores de estrutura, através de mapas de diferença de Fourier⁽⁷⁾. As fórmulas para o cálculo da densidade eletrônica e fatores de estrutura aplicáveis a cada um dos grupos espaciais estão apresentadas no Apêndice 1.

Após a localização das coordenadas posicionais dos átomos passou-se ao processo de refinamento da estrutura pelo método de mínimos quadrados⁽¹²⁾.

Para o cálculo dos fatores de estrutura foram usados os valores do fator de espalhamento atômico⁽⁸⁾ tabelados, con

siderando o fator de espalhamento anômalo.

Refinamento pelo método de mínimos
quadrados ⁽¹²⁾⁽¹³⁾

O refinamento dos parâmetros atômicos é, em geral, feito pelo método de mínimos quadrados.

De um modelo dado ajusta-se esses parâmetros através de equações montadas a partir de dados observados. Essas equações podem ser descritas em forma matricial como

$$\underline{Ax} = \underline{b} \quad (I)$$

onde:

A representa a matriz de ordem $N \times M$ ($M > N$)

$\underline{b}$ é o vetor de ordem N e $\underline{x}$ é o vetor das incógnitas de ordem N

Como o sistema de equações deriva de observações experimentais existem erros afetando tanto A como $\underline{b}$. Como o sistema possui maior número de equações que de incógnitas é muito pouco provável que o sistema admita solução.

Deve então ser encontrada uma forma que minimize de alguma maneira as equações que não podem ser satisfeitas. Para tal supõe-se que as equações são independentes e igualmente precisas.

Definindo o vetor resíduo $\underline{r}$ como

$$\underline{r} = \underline{b} - \underline{Ax} \quad (II)$$

constroee-se a soma do quadrado dos erros R como

$$R = \underline{r}^T \underline{r} \quad (III)$$

A solução da equação (I) é aquela que minimiza a função R e que satisfaz o critério de mínimos quadrados. A essa função R dá-se o nome de função de minimização.

Substituindo o valor de $\underline{r}$ pelo da equação (III) temos

$$R = (\underline{b} - A\underline{x})^T (\underline{b} - A\underline{x}) = \underline{b}^T \underline{b} - 2\underline{b}^T A\underline{x} + \underline{x}^T A^T A \underline{x}$$

Como a derivada da função de minimização é nula em relação a cada uma das incógnitas obtêm-se ($\partial R / \partial \underline{x} = 0$)

$$-2\underline{b}^T A + 2\underline{x}^T A^T A = 0 \quad (IV)$$

ou seja

$$A^T A \underline{x} = A^T \underline{b} \quad (V)$$

A solução de (V) é dada por

$$\underline{x} = (A^T A)^{-1} A^T \underline{b} \quad (VI)$$

que são conhecidas como "equações normais" e dão as N componentes de $\underline{x}$ que melhor satisfazem (I).

Para o refinamento dos parâmetros atômicos a função que é minimizada é

$$R = \sum_{hkl} \omega (|F_o| - |F_c|)^2 = \sum \omega \Delta^2 \quad (VII)$$

onde a somatória é feita sobre todo o conjunto de planos (hkl) cristalograficamente independentes e os $\omega(hkl)$ representam o peso atribuído a cada plano.

buido a cada reflexão.

Para montar as equações normais a partir dos dados observados adota-se o seguinte procedimento: lineariza-se o fator de estrutura desenvolvendo-o em série de Taylor e, dispensados os termos de ordem superior

$$|F_o| = |F_c(p_j)| + \sum_{j=1}^{N_p} \frac{\partial |F_c|}{\partial p_j} \Delta p_j$$

ou

$$|F_o| - |F_c(p_j)| = \sum_{j=1}^{N_p} \frac{\partial |F_c|}{\partial p_j} \Delta p_j \quad (\text{VIII})$$

onde a somatória é feita sobre o número total de parâmetros, p_j representa os N_p parâmetros atômicos que devem ser ajustados e Δp_j o erro associado a eles.

Obtêm-se tantas equações (VIII) quanto o número de medidas de F_o .

Esse sistema de equações pode ser escrito na forma matricial

$$A\underline{x} = \underline{b}$$

onde

A é a matriz que representa todos os $\frac{\partial |F_c|}{\partial p_j}$

$\underline{x} = \underline{\bar{e}}$ o vetor que representa os Δp_j e

$\underline{b}$ é o vetor $|F_0| - |F_c(p_j)|$.

Usando (VI) teremos as equações normais em termos dos fatores de estrutura e dos parâmetros iniciais.

CAPÍTULO II

RESOLUÇÃO E REFINAMENTO DAS ESTRUTURAS DE COMPLEXOS DE BENZIL E FENIL FOSFINÓXIDO COM CLORETO DE COBALTO(II)

I. INTRODUÇÃO

Neste Capítulo apresenta-se o refinamento da estrutura do Dicloro bis(tribenzilfosfinóxido) Cobalto(II), $\text{CoCl}_2[(\text{C}_7\text{H}_7)_3\text{PO}]_2$, $\text{C}_{42}\text{H}_{42}\text{Cl}_2\text{CoO}_2\text{P}_2$ e a determinação e refinamento das estruturas dos: Dicloro bis(dibenzilfenilfosfinóxido) Cobalto(II), $\text{CoCl}_2[(\text{C}_7\text{H}_7)_2(\text{C}_6\text{H}_5)\text{PO}]_2$, $\text{C}_{40}\text{H}_{38}\text{Cl}_2\text{CoO}_2\text{P}_2$; Dicloro bis(benzildifenilfosfinóxido) Cobalto(II), $\text{CoCl}_2[(\text{C}_7\text{H}_7)(\text{C}_6\text{H}_5)_2\text{PO}]_2$, $\text{C}_{38}\text{H}_{34}\text{Cl}_2\text{CoO}_2\text{P}_2$; Dicloro bis(trifenilfosfinóxido) Cobalto(II), $\text{CoCl}_2[(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{PO}]_2$, $\text{C}_{36}\text{H}_{30}\text{Cl}_2\text{CoO}_2\text{P}_2$.

O desenvolvimento de um trabalho de determinação de estruturas cristalinas e moleculares, como o aqui apresentado, envolve a manipulação de um grande número de dados, o que o torna impraticável sem o uso de computadores digitais. Para a realização deste trabalho foi usado o computador digital PDP11/45 do Departamento de Física e Ciências dos Materiais.

Os programas utilizados nos cálculos em geral, constam do "Structure Determination Package" desenvolvido pela Enraf Nonius, Inc. especialmente para o sistema em uso no Laboratório de Cristalografia do Instituto de Física e Química de São Carlos-USP. Em alguns casos houve necessidade de modificações e desenvolvimentos de programas, que passaram a integrar a biblioteca de programas do laboratório.

Todas as tabelas apresentadas no trabalho são có -

pias das feitas pelo computador, e portanto utilizando a convenção inglesa de notação numérica.

Refinamento da Estrutura do Dicloro bis(tribenzilfosfinóxido)Cobalto(II)⁽¹⁴⁾ - $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$

Introdução

A resolução da estrutura deste complexo foi apresentada como parte de nossa dissertação de mestrado⁽¹⁴⁾. O trabalho desenvolvido posteriormente refere-se ao refinamento final da estrutura.

Para maior clareza a solução e refinamento da estrutura é aqui apresentada de forma completa.

Parte Experimental

As amostras foram obtidas⁽¹⁾, no Instituto de Química de Araraquara-UNESP, pela mistura de soluções alcoólicas do sal e do ligante orgânico em proporções estequiométricas. A solução foi concentrada e depois resfriada numa geladeira, até o aparecimento de cristais. Usualmente os cristais tinham a aparência de bipiramedes muito bem formadas, de cor azul intenso.

Através de métodos fotográficos de Weissenberg⁽¹⁵⁾ e precessão⁽¹⁶⁾ chegou-se aos dados cristalográficos iniciais. As dimensões da cela unitária: $a=15,133(1)$; $b=15,905(1)$; $c=16,493(1)\text{\AA}$, ortorrômbico, $V=3954\text{\AA}^3$ foram confirmadas por difratometria, através de uma cortesia da Philips da Holanda, pelo uso de um difratômetro automático PW 1100. As seguintes extinções sistemáticas foram encontradas: $h00$ para $h=\text{ímpar}$, $0k0$ para $k=\text{ímpar}$ e $00l$ para $l=\text{ímpar}$, levando à conclusão de tratar-se do grupo espacial $P2_12_12_1$. A densidade ob

servada $1,29(1)\text{g/cm}^3$ medida por flotação, mostrou existirem 4 moléculas por cela unitária. Admitindo $Z=4$ obtivemos a densidade calculada igual a $1,289(2)/\text{cm}^3$.

Usando o difratômetro PW1100 foram medidas as intensidades de 2110 reflexões independentes. A radiação usada foi MoK α monocromada por grafite, no modo θ - 2θ , com ângulo de varredura igual a 1° e velocidade de varredura de $0,09^\circ/\text{segundo}$. A contagem da radiação de fundo nos dois extremos do pico foi tomada com fator $1/2$ do tempo total de varredura. Foram usadas 3 reflexões para controle de intensidade, 141, 230 e 330, remedidas a cada 100 reflexões. Durante todo o processo de medida não houve alteração significativa na intensidade das reflexões padrão.

Resolução e Refinamento da Estrutura

Os dados foram corrigidos pelos fatores de Lorentz e polarização e reduzidos aos correspondentes módulos de fatores de estrutura ($|F_h|$). Todas as reflexões nos quais o $|F_h|_{\text{observado}}$ era maior que três vezes o correspondente desvio padrão ($\sigma(F)$) foram consideradas como observadas, isto é, como estatisticamente superiores à radiação de fundo. Assim 2085 reflexões foram consideradas como pertencentes a essa categoria.

Não foi aplicada correção de absorção, uma vez que as dimensões do cristal usado estavam entre 0,5 e 0,3mm tendo coeficiente de absorção linear $\mu=6,989\text{cm}^{-1}$.

De forma a poder usar os Métodos Diretos, procedeu-se à determinação dos fatores de escala e de temperatura médio, através do método gráfico de Wilson e à normalização dos fatores de estrutura.

Usando o sistema de programa MULTAN foram determi

nadas as fases de 470 reflexões com valores de $|E_h|$ mais altos. Foram gerados 16 conjuntos de fases. Dois destes apresentaram as melhores figuras de mērito e os menores fatores R de Karle⁽¹⁷⁾. Com cada um desses conjuntos foram calculados mapas de E. Os cinco maiores picos encontrados foram atribuídos aos átomos de Cobalto, Cloros e Fósforos. Neste estágio não houve preocupação em discriminar entre Cloros e Fósforos. Ambas as soluções foram usadas para o cálculo dos fatores de estrutura e aquela que levou ao menor fator de discordância⁽⁷⁾ (R) foi escolhida como a verdadeira.

Assim estabeleceu-se definitivamente as coordenadas para os átomos considerados pesados. Mapas de diferença de Fourier revelaram os átomos restantes, exceto os hidrogênios.

As coordenadas de todos os átomos foram refinadas pelo método de mínimos quadrados por matriz completa, minimizando $\omega(k|F_o|-|F_c|)^2$ onde ω representa o sistema de pesos⁽¹⁸⁾, k o fator de escala, F_o o fator de estrutura observado e F_c o fator de estrutura calculado.

Foram usados fatores de vibração térmica isotrópica até $R=0,112$ e com a transformação dos mesmos em anisotrópicos o índice de discordância, após novos ciclos de refinamento, chegou a $R=0,075$. Neste ponto todos os ajustes foram menores que 3 vezes o erro no parâmetro refinado.

As posições dos hidrogênios não foram reveladas pelos mapas de diferença de Fourier. Suas coordenadas foram geradas assumindo-se a configuração do carbono a eles ligado com distância de ligação C-H de $1,0 \text{ \AA}$.

Novo refinamento, sem refinar os parâmetros dos h

drogênios porê^m incluindo-os no cálculo dos fatores de estrutura, levou a $R=0,065$ quando os ajustes tornaram-se menores que 2 vezes o erro no parâmetro.

Durante todo o processo foi usado o sistema de pesos unitário. Outros sistemas foram tentados porê^m sem resultado significativo para o refinamento.

Conclusões e descrição da estrutura molecular e cristalina

As tabelas I e II dão os parâmetros finais para os átomos na unidade assimétrica, com seus desvios padrão entre parênteses. As distâncias e ângulos intramoleculares estão apresentadas na tabela III.

As equações para os melhores planos dos anéis fenílicos foram obtidas pelo método de mínimos quadrados. A tabela IV dá as equações para os planos na forma $AX+BY+CZ+D=0$ onde A,B,C e D são constantes e X,Y,Z as coordenadas ortogonalizadas. Nesta tabela também se encontram os desvios de cada átomo do plano médio. Os ângulos diedros estão na tabela V.

A listagem de 2086 fatores de estrutura observados e calculados finais, e respectivos índices de Miller estão na tabela VI.

Uma representação da estrutura molecular do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ feita pelo ORTEP⁽¹⁹⁾ é mostrada na figura 1. O cobalto está tetraedricamente coordenado por 2 cloros e 2 oxigênios.

Os átomos de cloro e oxigênio são empacotados compactamente, como pode ser visto pelas distâncias interatômicas que

são iguais à soma dos raios de Van der Waals.

As maiores diferenças encontradas na estrutura central com relação ao tetraedro estão nos ângulos entre $\text{Cl}_1\text{-Co-Cl}_2$ e $\text{O}_1\text{-Co-O}_2$ que são respectivamente $113,0^\circ$ e $105,0^\circ$.

A tabela VII mostra as equações para os planos dos átomos centrais e os ângulos diedros entre eles.

As distâncias e ângulos interatômicos nos anéis fe nílicos são normais. Como pode ser visto na tabela II, há uma boa concordância entre as distâncias Co-Cl_1 e Co-Cl_2 ; Co-O_1 e Co-O_2 ; $\text{O}_1\text{-P}_1$ e $\text{O}_2\text{-P}_2$ respectivamente, onde os valores não diferem mais do que 2 vezes o desvio padrão.

Os ângulos $\text{Co-O}_1\text{-P}_1$ e $\text{Co-O}_2\text{-P}_2$ diferem entre si de 23° aproximadamente, impedindo a existência de um eixo de ordem 2 molecular esperado pela simetria dos ligantes e pela coordenação tetraédrica do Cobalto.

As distâncias intermoleculares não apresentaram ne nhuma evidência de ligação entre as moléculas, sendo o empacotamento cristalino um arranjo discreto das moléculas do complexo. Isto é mostrado em representação estereoscópica na figura 2 que foi obtida usando-se o programa ORTEP.

Determinação da estrutura molecular e
Cristalina do Dicloro bis(dibenzilfe-
nilfosfinóxido) Cobalto(II)
 $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$

Introdução

O estudo do complexo $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$ foi iniciado a -
través de métodos fotográficos de Weissenberg e precessão por Mas-
carenhas e Tomita⁽²⁰⁾ que obtiveram os dados cristalográficos ini-
ciais.

No trabalho acima citado foram feitas considera -
ções sobre a simetria da molécula e sobre o grupo espacial do sis-
tema monoclinico, determinado de forma ambigua como Cc ou C2/c, com
indicações prevalecendo para o grupo centrossimétrico concordan-
te com a possível existência de eixo 2 molecular.

O trabalho desenvolvido para a determinação da es-
trutura partiu das considerações feitas por Mascarenhas e Tomita,
confirmando a veracidade destas.

Parte Experimental

O complexo de $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$ foi obtido por Massabni
e Serra⁽¹⁾ no Instituto de Química de Araraquara da UNESP.

O sal e o ligante foram misturados na proporção es-
tequiométrica conveniente, em uma solução alcoólica em ebulição. Os

cristais de cor azul foram obtidos e recristalizados à frio em geladeira.

As intensidades das reflexões foram medidas no difratômetro CAD-4 Enraf-Nonius usando radiação $K\alpha$ do Molibdênio monocromada através de grafite.

Foram usadas as posições angulares de 21 reflexões para encontrar a cela unitária. Os resultados obtidos foram $a=18,187(9)$, $b=10,998(7)$, $c=18,954(3)\text{\AA}$ e $\beta=96,12^0(4)$. A densidade calculada com 4 moléculas por cela unitária é igual a $1,314(3)\text{g/cm}^3$.

As medidas de intensidade foram feitas no modo zigzag, no intervalo de θ igual a 0^0-22^0 , com ângulo de varredura $0,85+0,45\text{tg}\theta$, velocidade mínima de varredura de $20^0/\text{minuto}$ e tempo máximo de contagem de 60 segundos.

A reflexão 620 foi usada como controle de intensidade, sendo medida a cada 1200 segundos.

Foram medidas as intensidades de 2389 reflexões independentes, com 1248 observadas segundo o critério de $I>3\sigma(I)$.

A verificação prévia das extinções sistemáticas confirmou os grupos espaciais possíveis:

$hk\ell$ presente para $h+k = \text{par}$

$h0\ell$ presente para $\ell = \text{par}$ ($h = \text{par}$)

$0k0$ presente para ($k = \text{par}$)

Os grupos espaciais compatíveis com essas informações são Cc e $C2/c$, indistinguíveis, pertencentes ao grupo de Laue $2/m$.

Resolução da Estrutura

A possibilidade da existência de eixo 2 molecular, aliada ao fato de que o grupo C2/c possui posição especial sobre o eixo 2 cristalográfico com multiplicidade 4, levaram ao início do trabalho, usando como solução tentativa o grupo espacial centros-simétrico.

Não foi feita correção pelo fator de absorção, uma vez que o cristal usado para coleta dos dados de intensidade tinha dimensões adequadas. O coeficiente de absorção linear para a radiação de Molibdênio é $7,364\text{cm}^{-1}$.

A redução dos dados de intensidade das reflexões a módulos dos fatores de estrutura, foi seguida da aplicação do método gráfico de Wilson. A figura 3 mostra o gráfico do qual foram obtidos os valores do fator de escala e fator de temperatura médio, respectivamente iguais a 0,9888 e $4,619\text{\AA}^2$. Após a normalização dos fatores de estrutura, a distribuição estatística (tabela VIII) não mostrou evidência do centro de simetria, ficando os valores entre as duas distribuições teóricas, ou seja, entre a distribuição centrada e a não centrada.

A aplicação dos métodos diretos foi feita através do sistema de programas MULTAN. Usando as relações entre 360 reflexões com $|E_h| > 1,4$, a fim de fixar a origem foi atribuída fase 2π às reflexões $19\bar{2}$ e $22\bar{3}$. Outras cinco reflexões, com $|E_h|$ alto e envolvidos em grande número de relações $\Sigma 2$, foram escolhidas para

assumir todas as combinações possíveis de valores π e 2π . Com as reflexões 190; 246; 3,9,14; 466; 11,3,1 foram calculados 32 conjuntos de soluções através do refinamento e cálculo das fases pela aplicação da fórmula da tangente. A tabela IX mostra os 32 conjuntos com suas figuras de mérito.

Escolhido o conjunto 4 como o de "melhor" solução, foram calculados os mapas de E, usando os fatores de estrutura normalizados com as fases calculadas como coeficientes da Série de Fourier. Nestes mapas foram encontradas as posições dos 3 átomos pesados, sendo que foi atribuído ao Cobalto o mais alto pico o qual apareceu na posição especial 0 y 1/4 com multiplicidade 4, correspondente a posição sobre o eixo de ordem 2. Outros dois picos foram atribuídos a Cl e P.

Cálculos de fator de estrutura com refinamento do fator de escala, seguidos de mapas de diferença de Fourier revelaram os átomos de oxigênio e carbono.

O modelo inicial consistia de 1/2 molécula por unidade assimétrica, uma vez que o cálculo do número de moléculas por cela unitária dá $Z=4$ e a multiplicidade da posição geral para o grupo espacial $C2/c$ é 8.

Paralelamente tentou-se a solução da estrutura como não cêntrica no grupo espacial Cc , porém com os 47 átomos o índice de discordância não desceu além de $R=0,328$, mostrando que a escolha do grupo centrossimétrico era a correta.

Através de refinamento pelo método de mínimos qua-

drados com sistema de pesos unitário, usando fator de vibração térmica isotrópico, chegou-se até índice de discordância $R=0,142$. Como os ajustes fossem menores que 3 vezes o erro, transformou-se os fatores de vibração térmica em anisotrópicos e novos ciclos de refinamento sempre com sistema de pesos unitário levaram até $R=0,098$.

As posições dos hidrogênios foram calculadas admitindo-se a configuração adequada dos carbonos aos quais se ligam, e distancia C-H de $1,0 \overset{0}{\text{Å}}$.

Novos ciclos de refinamento dos átomos com peso atômico maior que o do hidrogênio, refinaram as posições no sentido da melhora dos ângulos e distâncias entre Carbonos.

Nos últimos estágios do refinamento foi usado o sistema de pesos tipo Cruickshank(18) com $\omega = (a |F_o|^2 + b|F_o| + c)^{-1}$; para as reflexões com $I > 3\sigma(I)$.

O refinamento foi considerado como terminado, com $R=0,073$ e $R_w = 0,076$.

As coordenadas atômicas finais e respectivos parâmetros de vibração térmica anisotrópica estão na tabela X.

Conclusões e descrição da estrutura molecular

Vê-se claramente na figura 4, onde a molécula do Dicloro bis(dibenzilfenilfosfinóxido) Cobalto(II) está representada com os átomos identificados, que o eixo 2 molecular passa pelo átomo de Cobalto, coincidente com o eixo cristalino de simetria .

Na figura 5 temos uma projeção estereoscópica, ORTEP, da estrutura molecular, com os elipsóides de vibração térmica*, e na figura 6 temos uma visão estereoscópica do empacotamento das 4 moléculas na cela unitária.

A parte central da molécula em torno do Cobalto, tem configuração tetraédrica ligeiramente distorcida com ângulo diedro entre os planos $\text{Cl}_1\text{-Co-Cl}_2$ e $\text{O}_1\text{-Co-O}_2$ de $88,6^\circ$. As equações para os planos dos átomos centrais e os ângulos diedros entre eles, estão na tabela XI.

A distorção do tetraedro é atribuída como nos outros casos semelhantes à diferença dos raios de Van der Waals do Cloro e Oxigênio.

As distâncias e ângulos intramoleculares e seus desvios estão na tabela XII. As distâncias C-C são normais para o tipo de composto estudado, e os ângulos nos anéis benzílicos em valor médio tendem a 120° que é o padrão para carbono de configuração trigonal (sp^2).

As equações para os melhores planos, calculados de forma usual, por mínimos quadrados, e os ângulos diedros entre eles estão na tabela XIII.

A tabela XIV mostra os valores para os fatores de estrutura observados e calculados finais.

*Nota: Os elipsóides são representados em uma escala de tal forma que incluam 20% da propabilidade⁽¹⁹⁾.

Determinação da estrutura do Dicloro
bis(benzildifenil fosfinóxido) Cobal-
to(II)

Introdução

Dentre os compostos de coordenação estudados neste trabalho, o Dicloro bis(benzildifenilfosfinóxido) Cobalto(II), foi o único que apresentou desde os dados prévios, um grupo espacial centrossimétrico de forma inequívoca.

Da mesma forma que no caso do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ ($P2_12_12_1$), não existe no grupo espacial $P2_1/c$, determinado para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$, a possibilidade da colocação do átomo de cobalto em eixo 2 molecular.

Este foi também o único conjunto de dados colhidos com radiação de cobre, ao invés de molibdênio, esperando-se por - tanto resultados menos precisos devidos à absorção.

Parte Experimental

Os cristais de $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$ foram obtidos no Instituto de Química de Araraquara segundo o método descrito por Mas-sabni e Serra⁽¹⁾.

A análise cristalográfica prévia por difração de raios-X foi feita por Mascarenhas e Tomita⁽²⁰⁾, através de méto -

dos fotográficos de precessão de Buerger e Weissenberg.

Visando a determinação da estrutura molecular e cristalina foram medidas 3658 intensidades de reflexões, usando o difratômetro automático CAD-4 Enraf Nonius com radiação de $\text{CuK}\alpha$ monocromada através de grafite.

Usando 15 posições angulares para encontrar e refinar os parâmetros da cela unitária chegou-se a

$$\begin{array}{ll} a = 10,217(2) \overset{\text{O}}{\text{Å}} & \beta = 112,15^\circ (3^\circ) \\ b = 16,776(2) \overset{\text{O}}{\text{Å}} & \text{PM} = 714,48 \\ c = 21,920(3) \overset{\text{O}}{\text{Å}} & d_{\text{obs}} = 1,37(1) \text{g/cm}^3 \\ Z = 4 \text{ moléc./cela unitária} & d_{\text{calc}} = 1,364(3) \text{g/cm}^3 \end{array}$$

As extinções sistemáticas verificadas:

$h \ 0 \ \& \text{ presente para } \& = \text{par}$

e

$0 \ k \ 0$ presente para $k = \text{par}$, levaram à determinação inequívoca do grupo espacial $P2_1/c$, do sistema cristalino monoclinico.

As medidas das intensidades foram feitas no modo de operação zig-zag no intervalo de θ entre $1,5^\circ$ e 23° , velocidade de varredura máxima de 10° por minuto, tempo máximo de medida igual a 2 minutos e ângulo de varredura igual a $0,8 \pm 0,2$ tange. O controle de intensidade foi feito a cada 50 reflexões através das reflexões $22\bar{2}$, $11\bar{5}$ e 121 .

Das 3658 reflexões medidas 198 corresponderam às

de controle de intensidade e 274 corresponderam a reflexões equivalentes por simetria. Com o critério de considerar como observadas aquelas maiores que $3\sigma(I)$ restaram 2932 reflexões observadas.

Após a redução das intensidades a módulos de fator de estrutura, sem correção por absorção, foi feita a aplicação do método gráfico de Wilson, resultando no encontro do fator de escala igual a 2,135, e fator de temperatura médio para todos os átomos igual a $1,850 \text{Å}^2$. (figura 7)

O fator de absorção linear calculado para a radiação de Cu é $60,493 \text{cm}^{-1}$.

A distribuição estatística dos fatores de estrutura normalizados pode ser vista na tabela XV.

A aplicação do sistema de programas Multan forneceu 8 conjuntos de fases usando para definir a origem as reflexões 0,11,6; 3,16,9 e 3,10,8 com fases iguais a 360° . Foram incluídas ainda no conjunto inicial mais 3 reflexões auxiliares: as 202; 418 e 8,1,12 assumindo cada uma os 2 valores possíveis de zero ou π . As fases das reflexões 040 e 0,20,0 foram calculadas como 360° pela relação $\Sigma 1$.

A tabela XVI mostra as figuras de mérito dos 8 conjuntos de fases, sendo que o de nº 5 apresentou as melhores figuras de mérito.

O mapa de E calculado a partir do conjunto número 5 mostrou o Cobalto, os Cloros e Fósforos.

Partindo-se desses 5 átomos foram feitos mapas de

diferença de Fourier sucessivos, intercalados de cálculos do fator de estrutura, que revelaram o restante dos átomos.

O refinamento das posições atômicas e fatores de temperatura isotrópicos levou o índice de discordância até $R=0,143$.

Transformando-se os fatores de temperatura isotrópicos em anisotrópicos e refinando novamente, o índice de discordância passou para 0,082.

A localização dos hidrogênios seguida de refinamento dos átomos de C, O, P, Cl e Co melhorou a determinação dos parâmetros de ligação ao nível dos anéis benzílicos e fenílicos.

O refinamento foi considerado como terminado quando a relação ajuste/erro foi menor que 2 para todos os parâmetros refinados.

O índice de discordância final para as reflexões observadas foi de 0,070 e de 0,078 incluindo as não observadas.

Todas as etapas do refinamento foram feitas com o sistema de pesos unitários por ser o mais adequado.

A tabela XVII mostra as coordenadas atômicas finais e respectivos fatores de vibração térmica.

Os fatores de estrutura observados e calculados finais estão na tabela XVIII.

Conclusões e descrição da estrutura molecular e cristalina

O arranjo molecular na cela unitária consta de qua

tro moléculas discretas empacotadas da forma vista na projeção estereoscópica ORTEP da figura 8.

A molécula isolada pode ser vista com os átomos identificados na figura 9, enquanto que os elipsóides de vibração térmica estão apresentados em projeção estereoscópica na figura 10.

A configuração tetraédrica ligeiramente distorcida do Cobalto foi verificada uma vez que os ângulos diedros entre os planos dos átomos centrais (Co, Cl e O) mostrados na tabela XIX, desviam-se de no máximo $3,5^\circ$ do ângulo teórico que seria 90° . Os ângulos interatômicos $Cl_1-Co-Cl_2$ e O_1-Co-O_2 respectivamente $121,8^\circ(1)$ e $104,0^\circ(1)$ são os que mais se desviam do valor teórico para um tetraedro perfeito.

A tabela XX mostra as distâncias e ângulos intramoleculares e seus respectivos desvios. As distâncias interatômicas são bastante próximas dos valores teóricos, não havendo nem mesmo nos anéis fenílicos e benzílicos valores que possam ser considerados anormais.

Os ângulos interatômicos $Co-O_1-P_1$ e $Co-O_2-P_2$ respectivamente $136,4^\circ(2)$ e $140,8^\circ(3)$ invalidam a presença de um eixo de ordem 2 molecular, embora teoricamente pudesse ser considerada a sua presença.

Os planos dos anéis calculados por mínimos quadrados e suas equações e ângulos diedros estão na tabela XXI.

Determinação da estrutura molecular e
cristalina do Dicloro bis(trifenilfos
finóxido) Cobalto(II)

Introdução

Os dados experimentais necessários para a determinação da estrutura molecular e cristalina do CoCl₂.2tfpo foram obtidos parte em São Carlos⁽²⁰⁾ no Laboratório de Cristalografia do IFQSC e parte no Departamento de Raios-X da Enraf Nonius Corp.

A estrutura cristalina e molecular foi então resolvida considerando o cristal como pertencente ao sistema monoclinico, grupo espacial C2 até índice de discordância R=0,055.

Visando-se a comparação com outras estruturas contendo Cobalto(II), foi feita uma pesquisa bibliográfica através do Cambridge Crystallographic Data File⁽²¹⁾ que levou a um artigo relativo à determinação da estrutura do mesmo composto de coordenação: a estrutura do CoCl₂.2tfpo determinada por Mangion e col.⁽²²⁾, também referida ao sistema monoclinico, porém no grupo espacial Cc.

Um estudo comparativo tornou possível a transformação da estrutura descrita no artigo supra mencionado, na resolvida no grupo C2. Entretanto o fato dos eixos de simetria das duas estruturas estarem intercambiados, implica em que a simetria real deva ser maior que a utilizada nos 2 casos.

Finalmente, a conclusão a que se chegou foi que o sistema cristalino real é ortorrômbico e o grupo espacial $Fdd2$.

A comparação da estrutura final com a do Dicloro bis(trifenilfosfinóxido) Cobre(II)⁽²³⁾, $(CuCl_2 \cdot 2tfpo)$ evidencia a inda que os dois complexos são isomorfos.

Para maior clareza na demonstração do trabalho realizado, este será dividido nos seguintes itens:

- a) determinação da estrutura no grupo espacial $C2$;
- b) comparação e transformação entre as estruturas monoclinicas;
- c) transformação e refinamento no sistema ortor -
rômbico;
- d) conclusões e descrição da estrutura

- a) Determinação da estrutura do Dicloro bis
(trifenilfosfinóxido) Cobalto(II) no gru
po espacial $C2$

Parte experimental

Os cristais de $CoCl_2 \cdot 2tfpo$ foram preparados por Massabni usando os métodos de Cotton e col.⁽²⁴⁾.

Os dados cristalográficos prévios⁽²⁰⁾ foram obtidos por métodos fotográficos de Weisseberg e precessão.

Para evitar a necessidade da correção dos dados de intensidade pelo fator de absorção foram escolhidos cristais apro-

ximadamente equidimensionais, com arestas entre 0,1 e 0,2mm.

Na ausência de equipamento de difratometria automática no Laboratório de Cristalografia do IFQSC, os cristais foram enviados ao Departamento de Cristalografia da Companhia Enraf Nonius em Nova York onde foram feitas as medidas das intensidades de 3288 reflexões independentes usando um difratômetro automático CAD-4 com modo de operação Zig-zag, com radiação $K\alpha$ do Molibênio monocromada por grafite. O ângulo de varredura foi de $0,6 \pm 1,0^\circ$ e o tempo máximo de medida igual a 120 segundos. Tais medidas cobrem o intervalo de θ de 0° a 25° , sendo medidas as reflexões com hkl entre -24 e 24, 0 e 12, 0 e 24, respectivamente. O tipo de varredura usado foi o ω -2 θ com velocidade de pré-varredura, para a ceitação da reflexão como observada, igual a 10° por minuto. Duas reflexões foram usadas como controle de intensidade, as 040 e 424, medidas a cada 5400 segundos. Não houve variação significativa nas medidas de controle, não havendo necessidade do reescalamento das intensidades.

Os parâmetros cristalinos refinados a partir dos ângulos de posicionamento de 25 reflexões resultaram:

$$\begin{array}{ll} a = 20,730(1) \text{ \AA} & \text{monoclínico} \\ b = 9,761(2) \text{ \AA} & \beta = 122,17^\circ(3) \\ c = 19,460(2) \text{ \AA} & V = 3333 \text{ \AA}^3 \\ Z = 4 \text{ moléc./cela unitária} & d_{\text{obs}} = 1,37(1) \text{ g.cm}^{-3} \\ \text{PM} = 686,43 & d_{\text{calc}} = 1,368(3) \text{ g.cm}^{-3} \end{array}$$

As extinções sistemáticas encontradas fotografica-

mente concordaram com as encontradas pela difratometria mostrando ser a cela do tipo C, com hk^2 presente somente para $h+k$ par, não havendo nenhuma restrição mais, a não ser as decorrentes.

Os grupos espaciais concordantes com essa extinção sistemática são C2, Cm e C2/m. Estes grupos espaciais são indistinguíveis, visto que correspondem ao grupo de Laue 2/m.

Resolução e refinamento da estrutura

Os dados de intensidade das reflexões enviados em fita magnética, foram lidos e reduzidos a módulos de fatores de estrutura. Não foi feita correção por absorção, uma vez que o cristal usado tinha dimensões adequadas tornando desnecessário corrigir os efeitos de absorção da radiação $K\alpha$ do Molibdênio, para a qual o fator de absorção linear calculado é igual a $8,22\text{cm}^{-1}$.

Das 3288 reflexões medidas, 70 eram as reflexões usadas como controle de intensidade. Das restantes, 2688 foram consideradas como observadas. As com $I < 3\sigma(I)$ foram incluídas no cálculo, porém marcadas como não observadas.

Com os módulos dos fatores de estrutura ($|F_0|$), determinou-se os fatores de escala e de temperatura médio, usando o método gráfico de Wilson, obtendo-se para escala 1,413 e para o fator de temperatura médio para todos os átomos $2,915\text{\AA}^2$. O gráfico obtido está na figura 11.

Para a verificação da existência ou não do centro

de simetria no grupo espacial foi feita a normalização dos fatores de estrutura no grupo espacial C2 e após isto a análise estatística dos E_h que mostrou a distribuição acêntrica (tabela XXII) indicando o grupo não centrossimétrico.

Foi escolhido o grupo espacial C2, por possuir eixo de ordem 2 cristalino, com posição especial favorável à colocação do Cobalto, que segundo Mascarenhas e Tomita⁽²⁰⁾ deveria estar sobre o eixo de ordem 2.

Foi aplicado o Método Direto pelo sistema de programas MULTAN. As primeiras tentativas falharam por dificuldades na escolha da origem. A análise dos mapas de convergência levou à escolha das reflexões 113 e 023 para fixação da origem, com fase 2π e $\pi/4$ ou $3\pi/4$, respectivamente. Como o grupo espacial C2 possui 2 eixos de ordem 2 independentes as reflexões usadas para fixar a origem de acordo com o módulo do vetor semi invariante⁽⁹⁾ devem ser do tipo $h0\ell$ e $h1\ell$. Para este caso não foi possível encontrar nenhuma reflexão $h0\ell$ forte. Foi escolhida então uma reflexão qualquer, no caso a 023, que poderia ter qualquer valor de fase. Entretanto para limitar a origem sobre um eixo 2 a fase desta reflexão deve estar num intervalo de $-\pi/2$ a $\pi/2$. Pela estrutura de programação o MULTAN usa para essa reflexão dois valores possíveis, $\pm\pi/4$. O enantiomorfo foi fixado pela reflexão 12,6,7 à qual foram atribuídos 2 valores de fase possíveis $\pi/4$ e $3\pi/4$. Duas outras reflexões serviram como auxiliares na determinação de fases, as 12,6,13 e 067 com valores de fase variando de $\pi/4$ em $\pi/4$, desde

45° até 360°. As figuras de mérito para os 64 conjuntos de soluções estão mostrados na tabela XXIII.

O melhor conjunto foi o de número 14 com figura de mérito combinada igual a 3, figura de mérito absoluta 1,457 e fator residual de Karle 24,65.

Com esse conjunto de 457 fatores de estrutura normalizados com suas fases calculadas foram calculados os mapas de E.

Os picos mais altos encontrados nestes mapas localizaram-se em dois conjuntos de posições especiais ($0y0$, $1/2\ 1/2 + y\ 0$; e $0\ y\ 1/2$, $1/2\ 1/2 + y\ 1/2$) e foram atribuídos a Co_1 e Co_2 , respectivamente.

Estas posições especiais correspondem a posição sobre o eixo de ordem 2 cristalino e eram adequadas à hipótese feita. Os outros 4 picos encontrados foram atribuídos a Cloros e Fósforos. O cálculo das distâncias e ângulos interatômicos mostrou que o modelo era quimicamente razoável.

Cálculo dos fatores de estrutura seguido do cálculo de mapas de diferença de Fourier levaram ao posicionamento de todos os átomos restantes.

O modelo para a estrutura neste estágio constava de duas meias moléculas. Ciclos sucessivos de refinamento de parâmetros pelo método de mínimos quadrados usando parâmetros de vibração térmica isotrópicos e com sistema de pesos unitário levaram a a tê índice de discordância $R=0,107$. Neste estágio todos os ajustes

sobre os parâmetros posicionais e de vibração térmica eram menores que 3 vezes os respectivos desvios padrão. Após a transformação dos fatores de temperatura em anisotrópicos, novos ciclos de refinamento melhoraram a estrutura até $R=0,073$.

O cálculo de mapas de diferença de Fourier não revelaram os hidrogênios.

Assumindo a configuração trigonal dos carbonos nos anéis fenílicos calculou-se a posição dos hidrogênios fixando a distância Carbono-Hidrogênio igual a $1,0 \text{ \AA}$.

Novos ciclos de refinamento pelo método de mínimos quadrados, incluindo os hidrogênios no cálculo, refinando somente os parâmetros térmicos e posicionais dos átomos de número maior de elétrons que eles, melhoraram as distâncias e ângulos C-C dos anéis. A otimização da estrutura foi levada até $R=0,055$ quando os ajustes nos parâmetros tornaram-se menores que 2 vezes o erro nestes.

Descrição da estrutura molecular e cristalina

Os parâmetros atômicos e seus desvios padrão estão na tabela XXIV.

A estrutura final constituiu-se de 2 meias moléculas por unidade assimétrica com os átomos de Cobalto sobre o eixo cristalográfico de ordem 2 que dessa forma é coincidente com o eixo 2 molecular. As distâncias e ângulos intramoleculares e todas as

outras tabelas tais como fatores de estrutura observados e calculados, ângulos diedros entre planos centrais e dos anéis encontram-se arquivadas no Laboratório de Cristalografia do IFQSC.

b) Comparação entre as estruturas monoclinicas

A estrutura do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ determinado por M. M. Mangion, R. Smith e S. G. Shore⁽²²⁾, apresenta os seguintes dados cristalográficos: $a=9,780(4) \text{ \AA}$, $b=20,172(10) \text{ \AA}$, $c=17,175 \text{ \AA}$, $\beta=106,51^\circ(4)$, $Z=4$ moléculas/cela unitária, grupo espacial Cc e $d_{\text{calc}}=1,37 \text{ g.cm}^{-3}$.

A unidade assimétrica consta de uma molécula, com o Cobalto tetraédrico, porém sem eixo 2 molecular. Enquanto que para a estrutura em C2 os ângulos Cl-Co-Cl e O-Co-O em ambas as moléculas independentes, são respectivamente $111,5^\circ$ e $100,4^\circ$, para a estrutura em Cc os valores são, na mesma ordem, $114,0^\circ$ e $94,3^\circ$.

A precisão sobre os parâmetros atômicos é aproximadamente a mesma, embora Mangion e col. não tenham refinado os parâmetros de vibração térmica dos carbonos, anisotropicamente.

O índice de discordância final de 0,060 não difere muito de 0,055 obtido para a estrutura em C2.

Embora a primeira vista parecesse tratar-se de uma outra forma de cristalização, o problema mereceu uma análise mais detalhada, tendo como resultado o que é exposto a seguir.

Para facilidade de expressão convencionou-se cha -

mar cela 1 à do complexo $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ exposto no item anterior e cela 2 à determinada por Mangion e col.

Comparando-se os parâmetros cristalográficos verifica-se que:

$$a_1 = b_2, \quad b_1 = a_2, \quad c_1 \neq c_2 \quad \text{e} \quad \beta_1 \neq \beta_2$$

A troca de eixos $\vec{a}_1$ por $\vec{b}_2$ e $\vec{b}_1$ por $\vec{a}_2$ aliada à inexistência do eixo 2 molecular na estrutura 2 chamou a atenção.

O sistema monoclínico possui eixo único e no segundo posicionamento, este eixo é coincidente com a direção do eixo cristalográfico $\vec{b}$. Este fato torna impossível a troca de $\vec{a}$ por $\vec{b}$ sem mudança do grupo espacial. Assim, para que as estruturas fossem idênticas havia necessidade de $\vec{a}_1$ ser igual a $\vec{a}_2$.

Através da análise dos parâmetros aliada à análise das intensidades das reflexões, chegou-se à matriz de transformação da cela 2 na cela 1 e vice-versa.

A matriz encontrada foi:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & T & 0 \\ T & 0 & 0 \\ \frac{T}{2} & \frac{1}{2} & T \end{bmatrix}$$

A aplicação da matriz A aos parâmetros cristalográficos da cela 1 levou-os a serem idênticos aos da cela 2.

Como se sabe (veja apêndice 1) o tensor métrico é dado por:

-41-

$$T = \begin{bmatrix} a^2 & ab\cos\gamma & accos\beta \\ ab\cos\gamma & b^2 & bccos\alpha \\ accos\beta & bccos\alpha & c^2 \end{bmatrix}$$

Então seja:

T_1 o tensor métrico da cela 1

T_2 o tensor métrico da cela 2

Como

$$T_2 = A T_1 A^T$$

temos

$$T_2 = \begin{bmatrix} 0 & T & 0 \\ T & 0 & 0 \\ \frac{T}{2} & \frac{1}{2} & T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 429,7388 & -0,0006 & -214,7862 \\ -0,0006 & 95,2847 & -0,0078 \\ -214,7862 & -0,0078 & 378,7238 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & T & \frac{T}{2} \\ T & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & T \end{bmatrix}$$

$$T_2 = \begin{bmatrix} 95,2847 & -0,0006 & -47,6498 \\ -0,0006 & 429,7388 & 0,0835 \\ -47,6498 & 0,0835 & 295,1973 \end{bmatrix}$$

o que nos permite calcular os parâmetros da cela 2: $a=9,761 \text{ \AA}$, $b=20,730 \text{ \AA}$, $c=17,181$, $\alpha=\gamma=90^\circ$ e $\beta=106,51^\circ$.

Verificado serem ambas as celas unitárias equivalentes indicando portanto que os dois complexos podem pertencer ao mesmo grupo espacial, passou-se à transformação das posições atômicas.

A formulação matemática adequada para a aplicação da matriz de transformação sobre as coordenadas atômicas está demonstrada no apêndice 2. As coordenadas atômicas são contravariantes em relação à matriz coluna que caracteriza a cela direta, portanto a matriz de transformação deve ser $(A^{-1})^T$, isto é:

$$\begin{bmatrix} 0 & T & \frac{T}{2} \\ T & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & T \end{bmatrix}$$

Sabendo-se que as origens das celas 1 e 2 poderiam ser diferentes, para verificação da matriz de transformação tomou-se vetores diferença entre átomos equivalentes em ambas as celas. Foram escolhidos os vetores entre Cobalto e Cloro de ambas, e a aplicação da transformação é mostrada a seguir.

Seja v_1 o vetor diferença entre Co_1 e Cl_1 da cela 1 de coordenadas $1/2, 1/2, 0$ e $0,6056; 0,6294; 0,0623$, respectivamente e v_2 o vetor diferença entre Co e Cl_1 da cela 2 de coordenadas $0,2500; 0,1250; 0,5000$ e $0,0964; 0,0507; 0,4378$.

A diferença entre as coordenadas dá:

$$v_1 = \begin{bmatrix} -0,1056 \\ -0,1294 \\ -0,0623 \end{bmatrix}$$

$$v_2 = \begin{bmatrix} 0,1536 \\ 0,0743 \\ 0,0622 \end{bmatrix}$$

Aplicando

$$(A^{-1})^T \cdot v_1 \quad \text{obtemos}$$

$$\begin{bmatrix} 0 & T & \frac{T}{2} \\ T & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -0,1056 \\ -0,1294 \\ -0,0623 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,1605 \\ 0,0744 \\ 0,0623 \end{bmatrix}$$

que reproduz razoavelmente v_2 .

A mesma verificação foi feita sobre outros vetores diferença com resultados satisfatórios.

Comprovada a veracidade da transformação, passou-se à transformação das coordenadas das posições atômicas. Para estas, a transformação depende também da translação da origem.

Então

$$x_2 = (A^{-1})^T \cdot x_1 + t$$

onde

x representa o vetor posição atômico e

t o vetor translação

Para encontrar a translação foram escolhidos os $\bar{a}$ -

tomos de Co de ambas as celas. Para a cela 1 foi escolhido o Cobalto localizado na origem (000).

Assim, chamando

$$X = (A^{-1})^T \cdot x_1$$

temos que

$$X = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Então

$$x_2 = X + t \quad \text{ou}$$

$$x_2 - X = t$$

de onde obtemos

$$t = \begin{bmatrix} 0,2500 \\ 0,1250 \\ 0,5000 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,2500 \\ 0,1250 \\ 0,5000 \end{bmatrix}$$

Então para qualquer x_1

$$x_2 = (A^{-1})^T \cdot x_1 + \begin{bmatrix} 0,2500 \\ 0,1250 \\ 0,5000 \end{bmatrix}$$

A comprovação feita para o Co de coordenadas 0 1/4 1/2 da cela 1 resultou em:

$$\begin{bmatrix} 0 & T & \frac{T}{2} \\ T & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & T \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0,000 \\ 0,2500 \\ 0,5000 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0,2500 \\ 0,1250 \\ 0,5000 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0,2500 \\ 0,3750 \\ 0,000 \end{bmatrix}$$

Através da operação de simetria $1/2+x, 1/2-y, 1/2+z$, própria do grupo espacial Cc sobre x_2 obtêm-se 0,2500; 0,1250 ; 0,5000 que é a posição exata do Cobalto na cela 2.

A mesma transformação aplicada sobre todos os átomos da cela 1 reproduziu os átomos da cela 2. A transformação da cela 1 na cela 2 foi constatada assim, como verdadeira em todos os níveis.

Como é impossível que o mesmo cristal pertença ao mesmo tempo a dois grupos espaciais diferentes, tornou-se verdadeira a suspeita de que a simetria usada em ambos os casos fosse menor que a verdadeira.

Voltando à análise do tensor métrico de ambas as estruturas através da matriz de Niggli⁽²⁵⁾ verificou-se que a simetria aparente era do sistema ortorrômbico.

c) Transformação e refinamento no sistema ortorrômbico

O estudo da matriz de Niggli das células unitárias monoclinicas e em particular da cela C2 igual a:

$$\begin{aligned} S_{11} &= 429,7388, & S_{22} &= 95,2847, & S_{33} &= 378,7238, \\ S_{32} &= -0,0078, & S_{31} &= 214,7862, & S_{12} &= 0,0006, \end{aligned}$$

mostrou $S_{31} = S_{11}/2$ que leva à matriz de transformação

$$B = \begin{pmatrix} T & 0 & 0 \\ T & 0 & \bar{Z} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{que transforma}$$

a cela monoclinica P em ortorrômbica centrada C.

Como a cela monoclinica sobre a qual é feita a transformação é centrada C, a cela ortorrômbica resultante é centrada do tipo F.

Através da aplicação da matriz sobre o tensor métrico (apêndice 2) chega-se a:

$$\begin{aligned} a &= 20,730(2) \text{ \AA} & \alpha = \beta = \gamma &= 90^\circ \\ b &= 32,947(6) \text{ \AA} & V &= 6666 \text{ \AA}^3 \\ c &= 9,761(2) \text{ \AA} \end{aligned}$$

Com esses novos valores para os eixos cristalográficos, o cálculo do número de moléculas por cela unitária fornece 8 moléculas.

A verificação da simetria cristalográfica foi feita através da aplicação da matriz B sobre os índices de Miller das reflexões (apêndice 2).

Após a transformação verificou-se que das 3218 reflexões, apenas 1560 eram independentes. O Anexo 1 corresponde à listagem do programa MEDIA usado para detectar as reflexões iguais em índice de Miller e fazer a média das intensidades.

Destas 1560 reflexões, 1294 são estatisticamente

superiores a 3 vezes o seu desvio padrão ($I > 3\sigma(I)$).

A análise das extinções sistemáticas mostrou

hkl presente para $h+k, k+l, (l+h) = \text{par}$

$h0l$ presente para $l+h = \text{múltiplo de } 4; (h, l = \text{par})$

$0kl$ presente para $k+l = \text{múltiplo de } 4; (k, l = \text{par})$

$hk0$ presente para $h, k = \text{par}$

$h00$ presente para $(h = \text{múltiplo de } 4)$

$0k0$ presente para $(k = \text{múltiplo de } 4)$

$00l$ presente para $(l = \text{múltiplo de } 4)$,

características do grupo espacial $Fdd2$.

A multiplicidade deste grupo espacial é 16, por - tanto havendo 8 moléculas por cela unitária, o Cobalto deveria estar em posição especial.

A transformação das coordenadas atômicas através de $(B^{-1})^T$ (apêndice 2) fez com que as duas meias moléculas da cela $C2$ não sejam mais independentes.

O Cobalto colocou-se sobre a posição $0,0,z$, assumindo as coordenadas 000 .

A estrutura transformada foi então refinada, usando-se os fatores de vibração térmica isotrópica, tomados com os valores finais da estrutura em $C2$. O índice de discordância para essa fase foi $R=0,095$.

Com a transformação dos fatores de temperatura em anisotrópicos, seguida de novos ciclos de refinamento, sempre pelo método de mínimos quadrados o índice de discordância caiu para 0,073. O sistema de pesos usado foi o unitário.

Como os mapas de diferença de Fourier não mostraram a posição dos hidrogênios, suas posições foram calculadas admitindo-se a configuração trigonal para os carbonos nos anéis fenílicos.

O refinamento final dos parâmetros atômicos para C, O, P, Cl e Co foi feito usando-se o sistema de pesos tipo Cruick-hank até ajustes menores que 2 vezes o desvio no parâmetro refinado.

O índice de discordância R final ponderado foi de 0,047 e 0,049 sem peso.

A tabela XXV mostra os parâmetros atômicos finais e respectivos desvios padrão.

d) Conclusões e descrição da estrutura

A estrutura cristalina do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ consiste de um arranjo discreto de 8 moléculas na cela unitária. A figura 12 mostra uma projeção estereoscópica da cela unitária.

A molécula isolada com os átomos identificados é mostrada na figura 13, enquanto que na figura 14 podem ser vistos os elipsóides de vibração térmica em projeção estereoscópica.

As distâncias e ângulos intramoleculares estão na ta

bela XXVI.

O Cobalto está colocado sobre o eixo de ordem 2 cristalográfico, coincidente com o eixo 2 molecular. A sua configuração é tetraédrica ligeiramente distorcida com o menor ângulo ($100,3^{\circ}$) entre O-Co-O e o maior ($111,6^{\circ}$) entre Cl-Co-Cl. Os ângulos diedros entre os planos O-Co-O e Cl-Co-Cl e Cl-Co-O estão na tabela XXVII, juntamente com as equações calculadas para os planos expressos em relação ao sistema de coordenadas ortogonais usual.

Os planos calculados pelo método de mínimos quadradas para os anéis fenílicos estão na tabela XXVIII, juntamente com os ângulos diedros entre eles. Os fatores de estrutura observados e calculados finais estão na tabela XXIX.

Embora a estrutura do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ seja isomorfa da do $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ ⁽²³⁾, aparecem diferenças significativas nas moléculas.

A distorção da coordenação tetraédrica do Cobalto é bastante menor que a do Cobre. Enquanto o ângulo diedro entre os planos Cl-Co-Cl e O-Co-O é de $87,93^{\circ}$, no caso do Cobre o mesmo ângulo é de $71,6^{\circ}$.

Em termos de distâncias intramoleculares, a maior diferença aparece nas ligações Co-Cl e Cu-Cl que são respectivamente $2,243(4) \text{ \AA}$ e $2,170(2) \text{ \AA}$, sendo portanto maior o comprimento de ligação com o Cobalto. Nas ligações Co-O e Cu-O acontece o inverso $1,940(10) \text{ \AA}$ e $1,958(4) \text{ \AA}$ respectivamente.

Os ângulos Cl-Cu-Cl e O-Cu-O respectivamente $102,2^{\circ}(1)$

e $93,0^0(1)$ são ambos menores que os correspondentes para o Cobalto.

Outra diferença aparece nos ângulos Co-O-P e Cu-O-P que são na ordem $155,2^0(7)$ e $150,9^0(3)$.

Todas as outras distâncias de ligação e respectivos ângulos concordam dentro do desvio padrão correspondente.

Atribui-se essas diferenças à maior distorção da co ordenação do Cobre que em geral tende a ter estrutura quadrado plana, enquanto que o Cobalto é em geral tetraédrico quando tetra coordenado.

CONCLUSÕES

Nas quatro estruturas descritas no Capítulo II, o Cobalto apresenta-se tetraedricamente coordenado, como já era previsto. A distorção da coordenação tetraédrica entretanto, não se apresenta de forma regular na série quando se analisa os ângulos interatômicos centrais. Os ângulos entre Cl-Co-Cl variam desde $111,5^{\circ}(3)$ para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ até $121,78^{\circ}(7)$ para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$; enquanto que o ângulo O-Co-O vai de $100,2^{\circ}(7)$ a $104,98^{\circ}(30)$ para $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ e $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$, respectivamente. Um resumo das distâncias e ângulos entre os átomos centrais dos 4 complexos e os seus respectivos desvios padrão, é mostrado na tabela XXX.

Com relação aos ângulos interatômicos centrais, o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ é o que apresenta a menor distorção com relação ao tetraedro regular. No $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ o tetraedro apresenta-se alongado na direção do eixo 2 molecular, e para os $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$ e $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$ há um achatamento.

Analizando os ângulos diedros entre os planos Cl-Co-Cl e O-Co-O dados na tabela XXXI, verifica-se que a distorção do tetraedro central é na ordem crescente: $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo} < < \text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo} < \text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo} < \text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$.

Este tipo de distorção foi atribuído por Roy e Jeffery⁽²⁶⁾ à diferença entre os raios de Van der Waals dos átomos de cloro e oxigênio. Roy e Jeffery encontraram para a estrutura do Dicloro bis(N-benzildifenilfosfinamida) Cobalto(II)⁽²⁶⁾ os

ângulos de $116,5^{\circ}(2)$ para Cl-Co-Cl e $106,6^{\circ}(7)$ para O-Co-O . Estes valores estão contidos nos encontrados para os quatro complexos a apresentados no Capítulo II; entretanto analisando a série, verifica-se que a distorção do tetraedro central pode ser atribuída não só à diferença entre os raios de Van der Waals mas também à estereoquímica do ligante. Isto é, ao tipo de radical envolvido no fosfinóxido. A distorção no ângulo Cl-Co-Cl é muito maior para os oomplexos envolvendo mistura de radicais benzílicos e fenílicos (em média $11,6^{\circ}$) que para os que contêm trifenilfosfinóxido ou tribenzilfosfinóxido (em média $3,7^{\circ}$).

O ângulo O-Co-O sofre menos a influência do ligante, sendo que essa é máxima no caso do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ ($100,3^{\circ}$) onde há menos possibilidade de acomodação. O tribenzilfosfinóxido tem maior facilidade de acomodação estereoquímica devido ao fato dos radicais metilenos permitirem maior liberdade de giro aos anéis, podendo ser atribuída a este fato a menor distorção da coordenação do Cobalto.

A distância de ligação Co-Cl varia desde $2,243(4)\text{\AA}$ a $2,255(3)\text{\AA}$, podendo ser estabelecida genericamente a ordem $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$, $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$, $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$, $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ para o pequeno aumento do comprimento de ligação. Esses comprimentos de ligação são maiores que os encontrados por Roy e Jeffery⁽²⁶⁾ para a mesma ligação ($2,235(4)\text{\AA}$) no Dicloro bis(N-benzildifenilfosfinamida) Cobalto(II).

A ligação Co-O (tabela XXX) tem comprimentos vari-

ando desde $1,920(6)\overset{\circ}{\text{\AA}}$ para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ até $1,977(3)\overset{\circ}{\text{\AA}}$ para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$. Os valores desta ligação para os dois extremos da série são relativamente próximos, o mesmo acontecendo para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$ e o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$.

As distâncias de ligação Co-O para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$, e para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ são mais próximos dos valores encontrados por Roy e Jeffery⁽²⁶⁾ ($1,92(1)\overset{\circ}{\text{\AA}}$) e por Cotton e Soderberg⁽²⁷⁾ no Dinitrato bis(trimetilfosfinóxido) Cobalto(II), ($1,92(1)\overset{\circ}{\text{\AA}}$ e $1,95(1)\overset{\circ}{\text{\AA}}$) do que as determinadas para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$ e $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$, respectivamente $1,974(3)\overset{\circ}{\text{\AA}}$ e $1,977(3)\overset{\circ}{\text{\AA}}$.

O comprimento de ligação P-O também sofre variação na série desde $1,501(4)\overset{\circ}{\text{\AA}}$ para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$ até $1,529(4)\overset{\circ}{\text{\AA}}$ para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$ (tabela XXX). Todos os valores encontrados estão dentro da gama de valores para ligações semelhantes em outros complexos tais como Dinitrato bis(trimetilfosfinóxido) Cobalto(II)⁽²⁷⁾ ($1,53(3)\overset{\circ}{\text{\AA}}$ e $1,55(3)\overset{\circ}{\text{\AA}}$), Dicloro bis(N-benzildifenilfosfinamida) Cobalto(II)⁽²⁶⁾ ($1,50(1)\overset{\circ}{\text{\AA}}$), Di isotiocianato {[2-{[2-(dietilamino)etil] amino}etil]difenilfosfinóxido} Cobalto(II)⁽²⁸⁾ ($1,52(1)\overset{\circ}{\text{\AA}}$), Dicloro bis(trifenilfosfinóxido) Cobre(II)⁽²³⁾ ($1,492(4)\overset{\circ}{\text{\AA}}$) e Dibromo bis(trifenilfosfinóxido) Cobre(II)⁽⁵⁾ ($1,54(1)\overset{\circ}{\text{\AA}}$ e $1,50(1)\overset{\circ}{\text{\AA}}$).

Todos os valores encontrados para as distâncias da ligação P-O são maiores que aqueles das duas formas de cristalização do trifenilfosfinóxido puro. Para a forma monoclinica, Gusev e col.⁽²⁹⁾ encontraram $1,49(1)\overset{\circ}{\text{\AA}}$ e para a forma ortorrômbica, Bandoli e col.⁽³⁰⁾ determinaram $1,46(1)\overset{\circ}{\text{\AA}}$ para a mesma ligação. Este alongamento da ligação P-O pode ser atribuído, em todos os casos, ao e -

feito da coordenação do oxigênio ao Cobalto para a formação do complexo, além do efeito da estereoquímica do ligante que será discutido posteriormente.

A configuração do fósforo é aproximadamente tetraédrica e as suas ligações com os carbonos possuem comprimentos que variam, dentro da série, desde $1,748(3)\text{\AA}$ para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ (tabela III) até $1,849(6)\text{\AA}$ para o Metileno (C1F) do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$ (tabela XX). Essas distâncias também estão dentro da variação encontrada na literatura para compostos semelhantes, onde a menor é $1,74(1)\text{\AA}$ para o Dicloro bis(N-benzildifenilfosfinamida) Cobalto(II)⁽²⁶⁾ e a maior $1,86(1)\text{\AA}$ para o trifenilfosfinóxido na forma monoclinica⁽²⁹⁾.

Aparentemente as diferenças entre os comprimentos de ligação P-C devem-se mais à influência do empacotamento molecular cristalino sobre a estereoquímica das moléculas que propriamente ao tipo de radical envolvido, pois a variação é bastante grande mesmo dentro de um mesmo tipo de fosfinóxido. Para o trifenilfosfinóxido, a forma monoclinica apresenta para a ligação P-C os valores $1,79(1)\text{\AA}$, $1,82(1)\text{\AA}$ e $1,86(1)\text{\AA}$; a forma ortorrômbica: $1,75(1)\text{\AA}$, $1,77(1)\text{\AA}$ e $1,77(1)\text{\AA}$. Quando coordenado no $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ os valores para a mesma ligação são $1,791(15)\text{\AA}$, $1,798(15)\text{\AA}$ e $1,803(15)\text{\AA}$, enquanto que para o $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ ⁽²³⁾ os valores são $1,781(6)\text{\AA}$, $1,798(6)\text{\AA}$ e $1,822(6)\text{\AA}$ e para o $\text{CuBr}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ ⁽⁵⁾, $1,79(1)\text{\AA}$, $1,81(1)\text{\AA}$, $1,82(1)\text{\AA}$, $1,82(1)\text{\AA}$, $1,83(1)\text{\AA}$ e $1,84(1)\text{\AA}$.

Os ângulos de ligação Co-O-P para os complexos da

série em análise assumem os valores entre $135,2^{\circ}(2)$ e $176,0^{\circ}(8)$ para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$ e $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ respectivamente. O mesmo ângulo para o Dinitrato bis (trimetilfosfinóxido) Cobalto(II)⁽²⁷⁾ tem os valores $139,6^{\circ}(10)$ e $133,2^{\circ}(10)$; para o Dicloro bis (N-benzildifenil - fosfinamida)⁽²⁶⁾ $160,3^{\circ}(7)$, para o Diisitiocianato {[2-{[2-(diethylamino)etil]amino}etil]difenilfosfinóxido}Cobalto(II)⁽²⁸⁾ $134,4^{\circ}(7)$.

A diferença entre os ângulos de ligação Co-O-P parece estar ligada diretamente à estereoquímica do ligante fosforilado.

Quanto à simetria da molécula, pelo fato dos complexos apresentarem todos 1 cobalto para 2 ligantes e 2 cloros, esperava-se que fossem igualmente simétricos, isto é, que possuissem eixo 2 molecular. Este fato, entretanto, não se verifica. Enquanto o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ e o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$ apresentam eixo molecular coincidente com o eixo de ordem 2 cristalográfico, as moléculas de $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$ e $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ não são simétricas. Em ambos, $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ e $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$, os ângulos Co-O-P diferem o suficiente para a não existência de simetria.

Quanto à simetria do sistema cristalográfico tem-se $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$ e $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$ no sistema monoclinico (respectivamente $C2/c$ e $P2_1/c$) e $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ e $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ no sistema ortorrômbico (respectivamente $P2_12_12_1$ e $Fdd2$). O empacotamento é feito por moléculas discretas, não havendo em nenhum dos casos distâncias intermoleculares abaixo de $4,0\text{\AA}$.

Bertrand e col⁽⁵⁾ analisando os espectros de infravermelho do complexo $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ ⁽²³⁾ e $\text{CuBr}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ ⁽⁵⁾, na região do

estiramento da ligação P-O, levantaram a hipótese de que essa ligação deve ser influenciada pela simetria local da molécula. O $\text{CuBr}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ (assimétrico) mostrou duas frequências de estiramento (1145 e 1169cm^{-1}) enquanto que o $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$, isomorfo do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ (simétrico), mostrou frequência de estiramento P-O única (1142cm^{-1}).

Para a série do Cloreto de Cobalto(II) aqui estudada esta hipótese foi confirmada. Nos valores citados por Massabni⁽¹⁾ para as frequências de estiramento da ligação P-O verifica-se que o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ e o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$, que são simétricos, apresentam banda única (respectivamente 1155cm^{-1} e 1158cm^{-1}), enquanto que o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ e o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$, assimétricos apresentam duas bandas (respectivamente $1175, 1145\text{cm}^{-1}$ e $1172, 1133\text{cm}^{-1}$).

Sheka e col.⁽²⁾ comparando o caráter covalente da ligação entre o Cobalto(II) e o oxigênio do grupo fosforila pelo estudo da intensidade da banda ν_3 nos complexos tetraédricos encontraram que o caráter covalente desta ligação nos complexos do tipo $\text{CoCl}_2(\text{R}_3\text{PO})_2$ é maior no benzildifenilfosfinóxido que no trifenilfosfinóxido. Eles também concluíram que a intensidade da absorção no infravermelho próximo depende dos substituintes na molécula do ligante e que ela decresce com o aumento da eletronegatividade dos substituintes.

Em seu estudo sobre o mesmo tipo de complexos Massabni⁽¹⁾ encontrou uma inversão na ordem de basicidade dos ligantes, levando-o a concluir que o grau de covalência da ligação Co-O diminui com a substituição de radicais fenílicos por benzílicos no

ligante. Este resultado está em evidente desacordo com os encontrados por Sheka e Col.⁽²⁾.

Deve-se notar que as determinações feitas em ambos os trabalhos⁽¹⁾⁽²⁾, diferiram no solvente usado e na extensão da série estudada; sendo que Massabni⁽¹⁾ estudou complexos de cinco sais e quatro ligantes com substituição gradativa do radical fenílico por benzílico.

Entre os efeitos considerados por Massabni⁽¹⁾ para explicar a inversão da ordem de basicidade, tais como impedimento estérico, mudança da densidade eletrônica do oxigênio do grupo fosforila, possível existência de ponte de hidrogênio entre o oxigênio do grupo fosforila e o CH₂ dos grupos benzil, o ângulo Co-O-P e alterações na ligação π entre o fósforo e o oxigênio, o primeiro a ser discutido é a existência da ligação hidrogênio.

Os cálculos feitos para distâncias inter e intramoleculares não mostraram evidência destas ligações. Em todos os complexos envolvendo radicais benzílicos, embora as distâncias entre o oxigênio do grupo fosforila e os carbonos dos grupos metílicos nas ligações O-P-C estejam entre 2,7Å e 2,9Å, os hidrogênios, pela configuração tetraédrica do carbono, obrigatoriamente apontam na direção oposta ao oxigênio, ficando localizados entre 2,9Å e 3,0Å de distância do oxigênio. Os outros grupos metileno da mesma ou de outras moléculas estão a distâncias superiores a 3,0Å.

A ordem de basicidade estabelecida por Massabni⁽¹⁾ é $\text{tfpo} > \text{bdfpo} > \text{dbfpo} > \text{tbfo}$; portanto, o grau de covalência da ligação

Co-O deveria obedecer à mesma ordem.

Os valores para os complexos da série em estudo (tabela XXX) mostram que o comprimento da ligação Co-O obedece à ordem: $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo} < \text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo} < \text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$, ficando entretanto o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ deslocado na série por possuir o menor valor para essa ligação.

O efeito da coordenação sobre a ligação P-O, de a acordo com Sheka e col.⁽²⁾ e Massabni⁽¹⁾ deveria ser o inverso daquele sobre a ligação Co-O. O comprimento desta deveria aumentar na ordem $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo} < \text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo} < \text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo} < \text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$. Os da dos obtidos nas estruturas moleculares, entretanto, apresentam a mesma ordem que para a ligação Co-O, com o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$, novamente fora da sequência. Essa ordem entretanto sô é exata se tomarmos o valor médio para a ligação P-O nos compostos assimétricos.

Para os ângulos Co-O-P pode-se estabelecer a or - dem crescente $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo} < \text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo} < \text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ (tabela XXX).

Novamente o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ fica deslocado na série.

Todos os efeitos analisados sobre as ligações Co-O, P-O, e sobre o ângulo Co-O-P levam a um número maior de considera ções sobre o efeito da estereoquímica do ligante.

O trifenilfosfinóxido forma com o CoCl_2 um comple xo simétrico; a troca de um radical fenílico por um benzílico le- va ao $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$, que já não possui a mesma configuração. A in- trodução de outro radical benzílico faz com que a simetria seja re recuperada e finalmente o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ não é simétrico . A mistura de

radicais fenílicos e benzílicos no mesmo ligante faz com que os ângulos Co-O-P sejam menores que para os complexos de ligantes envolvendo um único tipo de radical. O comprimento da ligação P-O também é afetado pelos ligantes que envolvem radicais benzílicos e fenílicos sob a forma de um aumento da distância entre o fósforo e o oxigênio.

O radical metileno do benzil permite ao anel benzenico a possibilidade de giro, tornando sua acomodação para formar o cristal mais livre. Este fato pode causar sua cristalização num grupo espacial não favorável a existência de simetria na molécula e pode ser o responsável pelos resultados discordantes do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ com relação aos outros da série.

O outro extremo da série, o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$, possui os anéis com menor liberdade de giro, maior impedimento estérico, possuindo configuração mais rígida ao nível dos ligantes, necessitando de maior simetria na molécula, causando sua cristalização no grupo espacial Fdd_2 , de simetria mais alta.

A acomodação estereoquímica do radical benzílico no $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$ é feita de forma assimétrica nos dois lados do tetraedro central devido ao impedimento estérico grande dos 2 radicais fenílicos. Observa-se que neste caso há uma diminuição do ângulo Co-O-P e um aumento na distância de ligação P-O para compensar o efeito sobre o ângulo.

No caso do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$ há apenas um radical fenílico e novamente a configuração da molécula pode ser tal que permi

te a existência do eixo 2 molecular, embora se observe um efeito maior sobre o ângulo Co-O-P e sobre a ligação P-O.

Os resultados da determinação da estrutura cristalina e molecular obtidos para a série são em parte concordes com os de Massabni⁽¹⁾ obtidos em solução em dicloroetano. Porém a discordância encontrada para o efeito de coordenação do ligante ao Cobalto sobre a ligação P-O, e a discordância total do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ com relação as ordens de comprimento de ligação e ângulo Co-O-P estabelecidas, levam a conclusões mais próximas das de Joesten e col.⁽⁴⁾ e das de De Bolster⁽³⁾, que em seus estudos encontraram efeitos semelhantes aos aqui relatados.

Pode-se concluir considerando todos os efeitos sobre as ligações P-O, Co-O e sobre o ângulo Co-O-P que suas variações dependem mais da estereoquímica do ligante que da eletronegatividade do mesmo. A pequena variação da ligação Co-O aliada à ordem de variação da ligação P-O parece indicar que o cobalto exerce o efeito de orientação dos ligantes e que a ligação é mais de natureza eletrostática.

Essa conclusão não pode entretanto ser tomada como definitiva pois no caso particular da série estudada há uma superposição de efeitos estéricos e eletrônicos dos substituintes. Para um reforço destas conclusões seria necessário eliminar um dos efeitos e estudar novas séries de compostos. Por exemplo com trimetilfosfinóxido e substituição gradativa de cada metileno por fenil para se verificar somente o efeito eletrônico.

APÊNDICE 1
EXPRESSÕES PARA O CÁLCULO DO FATOR DE ESTRUTURA
(F(hkl)) E DA DENSIDADE ELETRÔNICA (ρ(xyz))

A-1 Dicloro bis(tribenzilfosfinóxido) Cobalto(II)
Grupo espacial $P2_12_12_1$

$P2_12_12_1$
 D_2^4

No. 19

Origem a meio caminho
entre os 3 pares de eixos

$|x, y, z; \frac{1}{2}-x, \bar{y}, \frac{1}{2}+z; \frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-y, \bar{z}; \bar{x}, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}-z|$

$A = 4 \cos 2\pi \left(hx - \frac{h-k}{4} \right) \cos 2\pi \left(ky - \frac{k-l}{4} \right) \cos 2\pi \left(lz - \frac{l-h}{4} \right)$ $|F(hkl)| = |F(\bar{h}\bar{k}\bar{l})| = |F(h\bar{k}l)| = |F(hk\bar{l})| = |F(hkl)|$
 $B = -4 \sin 2\pi \left(hx - \frac{h-k}{4} \right) \sin 2\pi \left(ky - \frac{k-l}{4} \right) \sin 2\pi \left(lz - \frac{l-h}{4} \right)$

$\begin{cases} h+k=2n \\ k+l=2n \end{cases}$	$A = 4 \cos 2\pi hx \cos 2\pi ky \cos 2\pi lz$ $B = -4 \sin 2\pi hx \sin 2\pi ky \sin 2\pi lz$ = 0 if $h=0$ or $k=0$ or $l=0$	$\alpha(hkl) = -\alpha(\bar{h}\bar{k}\bar{l}) = -\alpha(h\bar{k}l) = -\alpha(hk\bar{l}) = -\alpha(hkl)$
$\begin{cases} h+k=2n \\ k+l=2n+1 \end{cases}$	$A = -4 \cos 2\pi hx \sin 2\pi ky \sin 2\pi lz$ $B = 4 \sin 2\pi hx \cos 2\pi ky \cos 2\pi lz$ = 0 if $h=0$	$\alpha(hkl) = -\alpha(\bar{h}\bar{k}\bar{l}) = -\alpha(h\bar{k}l) = \pi - \alpha(hk\bar{l}) = \pi - \alpha(hkl)$
$\begin{cases} h+k=2n+1 \\ k+l=2n \end{cases}$	$A = -4 \sin 2\pi hx \cos 2\pi ky \sin 2\pi lz$ $B = 4 \cos 2\pi hx \sin 2\pi ky \cos 2\pi lz$ = 0 if $k=0$	$\alpha(hkl) = -\alpha(\bar{h}\bar{k}\bar{l}) = \pi - \alpha(h\bar{k}l) = -\alpha(hk\bar{l}) = \pi - \alpha(hkl)$
$\begin{cases} h+k=2n+1 \\ k+l=2n+1 \end{cases}$	$A = -4 \sin 2\pi hx \sin 2\pi ky \cos 2\pi lz$ $B = 4 \cos 2\pi hx \cos 2\pi ky \sin 2\pi lz$ = 0 if $l=0$	$\alpha(hkl) = -\alpha(\bar{h}\bar{k}\bar{l}) = \pi - \alpha(h\bar{k}l) = \pi - \alpha(hk\bar{l}) = -\alpha(hkl)$

$$\rho(XYZ) = \frac{8}{V_c} \left\{ \sum_{h=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} |F(hkl)| [\cos 2\pi hX \cos 2\pi kY \cos 2\pi lZ \cos \alpha(hkl) - \sin 2\pi hX \sin 2\pi kY \sin 2\pi lZ \sin \alpha(hkl)] - \right. \\ \sum_{h=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} |F(hkl)| [\cos 2\pi hX \sin 2\pi kY \sin 2\pi lZ \cos \alpha(hkl) - \sin 2\pi hX \cos 2\pi kY \cos 2\pi lZ \sin \alpha(hkl)] - \\ \sum_{h=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} |F(hkl)| [\sin 2\pi hX \cos 2\pi kY \sin 2\pi lZ \cos \alpha(hkl) - \cos 2\pi hX \sin 2\pi kY \cos 2\pi lZ \sin \alpha(hkl)] - \\ \left. \sum_{h=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} |F(hkl)| [\sin 2\pi hX \sin 2\pi kY \cos 2\pi lZ \cos \alpha(hkl) - \cos 2\pi hX \cos 2\pi kY \sin 2\pi lZ \sin \alpha(hkl)] \right\}$$

A-2 Dicloro bis(dibenzilfenilfosfinóxido) Cobalto(II)
Grupo espacial C2/c

C2/c

No. 15

eixo único b

C_{2h}⁶

origem em $\bar{I}$ no plano de deslizamento c (0,0,0; $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$) $\pm$ | x,y,z; x, $\bar{y}$, $\frac{1}{2}+z$ |

$$A=8 \cos^2 2\pi \frac{k+l}{4} \cos 2\pi \left(hx+lz+\frac{l}{4} \right) \cos 2\pi \left(ky-\frac{l}{4} \right); \quad B=0 \quad F(hkl)=F(\bar{h}\bar{k}l)$$

$$\begin{cases} h+k=2n & A=8 \cos 2\pi(hx+lz) \cos 2\pi ky & F(hkl)=F(\bar{h}\bar{k}l) \neq F(\bar{h}kl); \quad F(\bar{h}kl)=F(hkl) \\ l=2n & B=0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} h+k=2n & A=-8 \sin 2\pi(hx+lz) \sin 2\pi ky; \quad B=0 & F(hkl)=-F(\bar{h}\bar{k}l) \neq F(\bar{h}kl); \quad F(\bar{h}kl)=-F(hkl) \\ l=2n+1 & A=B=0 \text{ if } k=0 \end{cases}$$

$$h+k=2n+1 \quad A=B=0$$

$$\rho(XYZ) = \frac{4}{V_c} \left\{ \sum_{h=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{l=2n} [F(hkl) \cos 2\pi(hX+lZ) + F(\bar{h}\bar{k}l) \cos 2\pi(-hX+lZ)] \cos 2\pi kY - \right. \\ \left. \sum_{h=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{l=2n+1} [F(hkl) \sin 2\pi(hX+lZ) + F(\bar{h}\bar{k}l) \sin 2\pi(-hX+lZ)] \sin 2\pi kY \right\}$$

A-3 Dicloro bis(benzildifenilfosfinóxido) Cobalto(II)
Grupo espacial P2₁/c

No. 14

P2₁/c

C_{2h}⁵

origem em $\bar{I}$

eixo único b

$\pm$ | x,y,z; x, $\frac{1}{2}-y$, $\frac{1}{2}+z$ |

$$A=4 \cos 2\pi \left(hx+lz+\frac{k+l}{4} \right) \cos 2\pi \left(ky-\frac{k+l}{4} \right); \quad B=0 \quad F(hkl)=F(\bar{h}\bar{k}l)$$

$$k+l=2n \quad A=4 \cos 2\pi(hx+lz) \cos 2\pi ky; \quad B=0 \quad F(hkl)=F(\bar{h}\bar{k}l) \neq F(\bar{h}kl); \quad F(\bar{h}kl)=F(hkl)$$

$$k+l=2n+1 \quad A=-4 \sin 2\pi(hx+lz) \sin 2\pi ky; \quad B=0 \quad F(hkl)=-F(\bar{h}\bar{k}l) \neq F(\bar{h}kl); \quad F(\bar{h}kl)=-F(hkl)$$

$$A=B=0 \text{ if } h=l=0 \text{ or if } k=0$$

$$\rho(XYZ) = \frac{4}{V_c} \left\{ \sum_{h=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{k+l=2n} [F(hkl) \cos 2\pi(hX+lZ) + F(\bar{h}\bar{k}l) \cos 2\pi(-hX+lZ)] \cos 2\pi kY - \right. \\ \left. \sum_{h=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{k+l=2n+1} [F(hkl) \sin 2\pi(hX+lZ) + F(\bar{h}\bar{k}l) \sin 2\pi(-hX+lZ)] \sin 2\pi kY \right\}$$

A-4 Dicloro bis(trifenilfosfinóxido) Cobalto(II)
Grupo espacial Fdd2

Fdd2

C_{2v}¹⁹

No. 43

origem em 2 (0,0,0; 0,½,½; ½,0,½; ½,½,0) + | x,y,z; x̄,ȳ,z̄; ½-x,½+y,½+z; ½+x,½-y,½+z |

$$A=8 \cos 2\pi \frac{h+l}{4} \cos 2\pi \frac{k+l}{4} \left\{ \cos 2\pi \frac{h-k}{4} \cos 2\pi(hx+ky) \cos 2\pi lz + \cos 2\pi(hx-ky) \cos 2\pi \left(lz - \frac{l}{4} \right) \right\}$$

$$B=8 \cos 2\pi \frac{h+l}{4} \cos 2\pi \frac{k+l}{4} \left\{ \cos 2\pi \frac{h-k}{4} \cos 2\pi(hx+ky) \sin 2\pi lz + \cos 2\pi(hx-ky) \sin 2\pi \left(lz - \frac{l}{4} \right) \right\} = 0 \text{ if } l=0$$

$$|F(hkl)| = |F(\bar{h}\bar{k}\bar{l})| = |F(h\bar{k}l)| = |F(hk\bar{l})| = |F(hkl)|$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} h+l=2n, k+l=2n & A=16 \cos 2\pi hx \cos 2\pi ky \cos 2\pi lz \quad \alpha(hkl) = -\alpha(\bar{h}\bar{k}\bar{l}) = \alpha(h\bar{k}l) = \alpha(hk\bar{l}) = -\alpha(hkl) \\ h+k+l=4n & B=16 \cos 2\pi hx \cos 2\pi ky \sin 2\pi lz \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} h+l=2n, k+l=2n & A=8 [\cos 2\pi(hx+ky) \cos 2\pi lz - \cos 2\pi(hx-ky) \sin 2\pi lz] \quad \alpha(hkl) = -\alpha(\bar{h}\bar{k}\bar{l}) \\ h+k+l=4n+1 & B=8 [\cos 2\pi(hx+ky) \sin 2\pi lz + \cos 2\pi(hx-ky) \cos 2\pi lz] \quad \alpha(hkl) = \alpha(\bar{h}\bar{k}\bar{l}) + \pi/2 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} (h, k, l \text{ all odd. Note. If } h+k+l=4n+1, \text{ then } -h-k-l=4n+3, \text{ etc.}) & \alpha(hkl) = -\alpha(\bar{h}\bar{k}\bar{l}) = \alpha(h\bar{k}l) = \alpha(hk\bar{l}) = -\alpha(hkl) \\ & -\alpha(hkl) + \pi/2 = -\alpha(hkl) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} h+l=2n, k+l=2n & A=-16 \sin 2\pi hx \sin 2\pi ky \cos 2\pi lz \quad \alpha(hkl) = -\alpha(\bar{h}\bar{k}\bar{l}) = \pi + \alpha(hkl) \\ h+k+l=4n+2 & B=-16 \sin 2\pi hx \sin 2\pi ky \sin 2\pi lz \quad -\pi + \alpha(hkl) = -\alpha(hkl) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} h+l=2n, k+l=2n & A=8 [\cos 2\pi(hx+ky) \cos 2\pi lz + \cos 2\pi(hx-ky) \sin 2\pi lz] \quad \alpha(hkl) = -\alpha(\bar{h}\bar{k}\bar{l}) \\ h+k+l=4n+3 & B=8 [\cos 2\pi(hx+ky) \sin 2\pi lz - \cos 2\pi(hx-ky) \cos 2\pi lz] \quad \alpha(hkl) = \alpha(\bar{h}\bar{k}\bar{l}) - \pi/2 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} (h, k, l \text{ all odd. Note. If } h+k+l=4n+3, \text{ then } -h-k-l=4n+1, \text{ etc.}) & \alpha(hkl) = -\alpha(\bar{h}\bar{k}\bar{l}) = \pi + \alpha(hkl) \\ & -\pi + \alpha(hkl) = -\alpha(hkl) \end{array} \right.$$

$$h+l=2n+1 \text{ or } k+l=2n+1 \text{ (indices mixed even and odd)} \quad A=B=0$$

$$\rho(XYZ) = \frac{8}{V_c} \left\{ \sum_{h=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} |F(hkl)| \cos 2\pi hX \cos 2\pi kY \cos [2\pi lZ - \alpha(hkl)] - \right.$$

$$\left. \sum_{h=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} |F(hkl)| \sin 2\pi hX \sin 2\pi kY \cos [2\pi lZ - \alpha(hkl)] \right\} +$$

$$\frac{4}{V_c} \left\{ \sum_{h=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} |F(hkl)| [\cos 2\pi(hX+kY) \cos [2\pi lZ - \alpha(hkl)] - \cos 2\pi(hX-kY) \sin [2\pi lZ - \alpha(hkl)]] + \right.$$

$$\left. \sum_{h=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{l=0}^{\infty} |F(hkl)| [\cos 2\pi(hX+kY) \cos [2\pi lZ - \alpha(hkl)] + \cos 2\pi(hX-kY) \sin [2\pi lZ - \alpha(hkl)]] \right\}$$

APÊNDICE 2

TRANSFORMAÇÃO DOS PARÂMETROS CRISTALOGRAFICOS DE- CORRENTE DE UMA MUDANÇA DE BASE

A necessidade da mudança da cela unitária corresponde matematicamente a uma mudança de base no espaço vetorial. Em forma matricial essa mudança de base⁽³¹⁾ pode ser expressa como:

$$D' = M D \quad \text{A-2.1}$$

onde D e D' são as matrizes coluna da velha e nova cela unitária na forma

$$D = \begin{bmatrix} \underline{a} \\ \underline{b} \\ \underline{c} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad D' = \begin{bmatrix} \underline{a'} \\ \underline{b'} \\ \underline{c'} \end{bmatrix}$$

onde $\underline{a}, \underline{b}, \underline{c}$, $\underline{a'}, \underline{b'}, \underline{c'}$ são os vetores que determinam as celas unitárias, e M representa a matriz de transformação ou matriz de mudança de base.

As transformações dos parâmetros cristalográficos decorrentes da mudança de base são necessárias em vários níveis ou seja:

- 1) Transformação do tensor métrico
- 2) Transformação das coordenadas atômicas
- 3) Transformação dos índices de Miller

1) Transformação do tensor métrico

Seja T a matriz que representa o tensor métrico da
do por

$$T = D.D^t \quad A-2.2$$

Se a cela unitária direta é transformada segundo
A-1.1, o novo tensor métrico T' pode ser escrito como

$$T' = D'.D'^t \quad A-2.3$$

Substituindo A-2.1 em A-2.3 obtêm-se

$$T' = M.D.(M.D)^t = M.D.D^t M^t$$

ou pela definição de T em A-2.2

$$T' = M T M^t \quad A-2.4$$

2) Transformação das coordenadas atômicas

Qualquer vetor posição p pode ser expresso na forma

$$p = x \underline{a} + y \underline{b} + z \underline{c} \quad A-2.5$$

quando referido a cela unitária direta original e como

$$p = x' \underline{a}' + y' \underline{b}' + z' \underline{c}' \quad A-2.6$$

quando referido a cela unitária transformada, ou em forma matricial

$$\underline{p} = \underline{x}^t D = \underline{x}'^t D' \quad \text{A-2.7}$$

onde $\underline{x}$ é o vetor de componentes x,y,z.

Reescrevendo A-2.7 na forma

$$\underline{x}^t . M^{-1} . M . D = \underline{x}'^t D'$$

por A-2.1 temos

$$\underline{x}^t M^{-1} = \underline{x}'^t$$

ou

$$\underline{x}' = (M^{-1})^t \underline{x} \quad \text{A-2.8}$$

que é a expressão das coordenadas atômicas referidas a cela unitária transformada em termos da matriz de mudança de base.

3) Transformação dos Índices de Miller

A condição de ortogonalidade entre o espaço real e o recíproco implica em

$$D^* D^t = D'^* D'^t = I \quad \text{A-2.9}$$

onde o * indica o espaço recíproco e I representa a matriz unitária.

Pre-multiplicando o primeiro membro de A-2.9 por $(M^t)^{-1}$ e pós-multiplicando por M^t obtêm-se

$$(M^t)^{-1} D^* D^t M^t = D'^* D'^t \quad \text{A-2.10}$$

ou seja

$$D'^* = (M^t)^{-1} D^* \quad A.2.11$$

De A-2.11 verifica-se que a cela unitária recíproca se transforma da mesma maneira que as coordenadas atômicas na cela direta.

Um vetor recíproco

$$\underline{v}^* = h \underline{a}^* + k \underline{b}^* + l \underline{c}^*$$

pode ser formalmente escrito como

$$\underline{v}^* = \underline{h}^t D^* \quad A.2.12$$

onde $\underline{h}$ é a matriz coluna que representa os índices de Miller hkl .

Como esse vetor é independente da base ou cela unitária de referência

$$\underline{h}'^t D'^* = \underline{h}^t D^* \quad A.2.13$$

Por substituição do valor de D'^* da equação A.2.11 obtêm-se

$$\underline{h}'^t (M^t)^{-1} D^* = \underline{h}^t D^*$$

ou seja

$$\underline{h}'^t (M^t)^{-1} = \underline{h}^t \quad A.2.14$$

Isolando $\underline{h}'$

$$\underline{h}' = M \underline{h} \quad A.2.15$$

que representa formalmente a aplicação da matriz de transformação da cela unitária sobre os vetores recíprocos referidos a cela anterior à transformação para obtenção dos novos índices de Miller referidos a cela transformada.

ANEXO I - Programa MÉDIA

```

C      PROGRAMA PRINCIPAL      REGINA SANTOS 31/5/78
      INTEGER*4 IMKL(SPP2),IM1,IK1
      DIMENSION BUF(16),BUFI(16),BUFD(16),BUFA(16),NPOINT(5000)
      1,N1(16)
      CALL ASSIGN (1,'STRUC,NME',9,IFRR)
      DEFINE FILE 1(92,32,0,IFL1)
      OPEN (UNIT=2,NAME='SYNIREFL.FDA',TYPE='OLD',ACCESS='DIRECT')
      OPEN (UNIT=3,NAME='SYNIREFL.NEW',TYPE='NEW',ACCESS='D
      IRECT',RECORDSIZE=16)
      OPEN (UNIT=4,NAME='SYNIREFL.INT',TYPE='NEW',ACCESS='D
      IRECT',RECORDSIZE=16)
      READ(1*3) N1
      NREF = N1(6)
      DO 10 I = 1,NREF
      READ(2*1) BUF
      CALL MKLSPL(BUF(1),IM,IK,IL)
      IM1=IM
      IM1=IABS(IM1)+1000000
      IK1=IK
      IK1=IABS(IK1)+1000
      IMKL(1)=IM1+IK1+IL+200000
      NPOINT(1) = 1
10      CONTINUE
      CALL SORT(IMKL,NPOINT,NREF)
      DO 101 I=1,NREF
      J=NPOINT(I)
      READ(2*J)BUF
      WRITE(4*1)BUF
101      CONTINUE
      DO 1134 J=1,100
      READ(2*NPOINT(J))BUF
      CALL MKLSPL(BUF(1),IM,IK,IL)
1134      TYPE 1222,IM,IK,IL
1222      FORMAT(21,3110)
      L = 0
      K = 1
      DO 120 I=1,NREF
      IF (I.EQ,NREF-1)GO TO 151
      IF (K.GT,1) GO TO 1001
      READ(4*1) BUF
      READ(4*1+1) BUFI
      READ(4*1+2) BUFD
      BUFA(2)=BUF(2)
      BUFA(5)=BUF(5)
      IF(IMKL(1).NE,IMKL(1+1)) GO TO 105
      IF(IMKL(1).EQ,IMKL(1+2)) GO TO 102
      BUFA(2) = (BUF(2)+BUFI(2))/2.
      BUFA(5) = (BUF(5)+BUFI(5))/2.
      K = K + 1
      GO TO 125
102      BUFA(2) = (BUF(2)+BUFI(2)+BUFD(2))/3.
      BUFA(5) = (BUF(5)+BUFI(5)+BUFD(5))/3.
      K = K + 2
105      CALL UNPACK(IMKL(1),IM,IK,IL)
      CALL MKLPCF(BUF(1),IM,IK,IL)
      L = L + 1
      WRITE(3*L) BUF(1),BUFA(2),BUF(3),BUF(4),BUFA(5),(BUF(N),N=6,16)
      GO TO 147
1001      K = K - 1
100      CONTINUE
151      READ (4*NREF=1)BUF
      CALL MKLSPL(BUF(1),IM,IK,IL)
      TYPE 1222,IM,IK,IL
      READ (4*NREF)BUF
      CALL MKLSPL (BUF(1),IM,IK,IL)
      TYPE 1222,IM,IK,IL
      STOP 'END OF FILE'
      END

```

Anexo 1 (continuação)

```

C      SUBROUTINE SORT
      SUBROUTINE SORT (MKL,INFORM,N)
      INTEGER*4 MKL(5000),NTEMP,JH,K,MINH,KMIN,L,LMIN
      DIMENSION INFORM(5000)
      NA = 1
      MINH = 0
      NZ = NA + N - 1
1     JH = 1000000 + MINH
      KMIN = 400
      NB = NA - 1
      DO 10 NC = NA,NZ
        IF(MKL(NC)/1000000.NE,MINH) GO TO 10
        NB = NB + 1
        NTEMP = MKL(NB)
        MKL(NB) = MKL(NC)
        MKL(NC) = NTEMP
        ITEMP = INFORM(NB)
        INFORM(NB) = INFORM(NC)
        INFORM(NC) = ITEMP
        K = (MKL(NB) - JH) / 1000
        IF(K.LT,KMIN) KMIN = K
10    CONTINUE
      IF(KMIN.EQ.400) GO TO 60
20    K = 1000 + KMIN
      LMIN = 400
      ND = NA - 1
      DO 30 NC = NA,NB
        IF(((MKL(NC)-JH)/1000).NE,KMIN) GO TO 30
        ND = ND + 1
        NTEMP = MKL(ND)
        MKL(ND) = MKL(NC)
        MKL(NC) = NTEMP
        ITEMP = INFORM(ND)
        INFORM(ND) = INFORM(NC)
        INFORM(NC) = ITEMP
        L = MKL(ND) - JH - K
        IF(L.LT,LMIN) LMIN = L
30    CONTINUE
      IF(LMIN.EQ.400) GO TO 50
      NF = NA - 1
40    DO 45 NC = NA,ND
        IF((MKL(NC)-JH-K).NE,LMIN) GO TO 45
        NF = NF + 1
        NTEMP = MKL(NF)
        MKL(NF) = MKL(NC)
        MKL(NC) = NTEMP
        ITEMP = INFORM(NF)
        INFORM(NF) = INFORM(NC)
        INFORM(NC) = ITEMP
45    CONTINUE
      NA = NF
      LMIN = LMIN + 1
      IF(ND-NA) 60,40,40
48    NA = NA + 1
50    KMIN = KMIN + 1
      IF(NB-NA) 60,55,20
55    NA = NA + 1
60    MINH = MINH + 1
      IF(NZ,GE,NA) GO TO 1
      RETURN
      END

C      SUBROUTINE UNPACK
      SUBROUTINE UNPACK(IMKL,IM,IK,IL)
      INTEGER*4 IMI,IKI,IMKL,IAUX
      IMI = IMKL / 1000000
      IAUX = (IMKL - IMI * 1000000 - 280200)
      IM=IMI
      IKI = IAUX / 1000
      IK=IKI
      IL = IAUX - IKI * 1000
      RETURN
      END

```

Fig.1 - Representação ORTEP da molécula de $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ com os átomos identificados

Fig.2 - Projeção estereoscópica do empacotamento molecular na cela unitária do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$

THE Y AXIS SHOWS LOG(AVE, F SQUARE / AVE, SUM OF SCATTERING FACTORS SQUARED).

THE X AXIS SHOWS THE AVERAGE SINE SQUARE.

Fig.3 - Gráfico de Wilson para a determinação dos fatores escala e temperatura para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$

Fig.4 - Representação ORTEP da molécula de $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$ com os átomos identificados

Fig.5 - Projeção estereoscópica da molécula de $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$ com representação dos elipsóides de vibração térmica

Fig.6 - Projeção estereoscópica do empacotamento molecular na cela unitária do $\text{CoCl}_2 \cdot \text{dbfpo}$

THE Y AXIS SHOWS LOG(AVE, F SQUARE / AVE, SUM OF SCATTERING FACTORS SQUARED).

THE X AXIS SHOWS THE AVERAGE SINE SQUARE.

Fig.7 - Gráfico de Wilson para a determinação dos fatores de escala e temperatura para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$

Fig.8 - Projeção estereoscópica do empacotamento molecular na cela unitária do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$

Fig.9 - Representação ORTEP da molécula de $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$ com os átomos identificados

Fig.10 - Projeção estereoscópica da molécula do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$ com representação dos elipsóides de vibração térmica

Fig.11 - Gráfico de Wilson para a determinação dos fatores de escala e temperatura para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$

Fig.12 - Projeção estereoscópica do empacotamento molecular na cela unitária do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$

Fig.13 - Representação ORTEP da molécula de $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ com os átomos identificados

Fig.14 - Projeção estereoscópica da molécula de $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ com representação dos elipsóides de vibração térmica

TABELA I - Parâmetros posicionais e de vibração térmica anisotrópica e respectivos desvios padrão ($\times 10^5$) do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$.

ATOM	X	Y	Z	$\sigma(1,1)$	$\sigma(2,2)$	$\sigma(3,3)$	$\sigma(1,2)$	$\sigma(1,3)$	$\sigma(2,3)$
CO	32444(15)	14290(15)	7734(14)	676(12)	692(14)	522(9)	-33(18)	-3(20)	51(17)
P1	28100(39)	3753(32)	26542(28)	763(29)	683(18)	524(19)	1(34)	57(38)	183(39)
P2	58801(31)	17592(30)	3874(28)	642(18)	627(20)	603(18)	-33(48)	78(36)	71(38)
CL1	27144(32)	27522(31)	7065(32)	845(25)	775(18)	811(16)	171(50)	25(46)	223(45)
CL2	27345(43)	5982(39)	-2248(32)	1413(37)	1129(26)	644(18)	-383(68)	-164(57)	-234(49)
O1	29723(77)	9277(74)	18143(71)	844(65)	757(58)	738(57)	56(115)	156(120)	128(133)
O2	45118(72)	14628(72)	7278(69)	831(56)	787(58)	696(47)	49(136)	116(146)	372(130)
C1	18210(121)	9787(102)	31330(96)	854(102)	584(81)	597(66)	58(112)	316(210)	-21(146)
C2	19087(114)	18622(113)	34008(96)	737(112)	870(110)	516(70)	156(215)	173(226)	26(235)
C3	19329(119)	25766(119)	28561(97)	838(100)	910(107)	504(95)	88(236)	194(210)	42(226)
C4	20757(148)	33787(124)	30747(126)	1305(143)	725(109)	916(103)	212(210)	-37(200)	22(210)
C5	22073(144)	35256(130)	38737(139)	1147(124)	829(142)	1221(130)	54(200)	-168(215)	-391(312)
C6	22321(147)	28404(149)	44716(109)	1201(132)	1382(139)	599(109)	302(185)	-85(244)	-722(199)
C7	20645(122)	20455(122)	41909(113)	897(120)	988(116)	648(95)	-89(215)	162(218)	-616(236)
C8	27715(122)	-3662(129)	26060(101)	943(117)	865(97)	559(89)	6(210)	332(203)	218(218)
C9	19437(114)	-8916(100)	21766(98)	808(119)	554(79)	636(84)	-99(215)	30(210)	334(137)
C10	12063(121)	-10663(125)	25717(104)	771(93)	1048(104)	673(89)	-388(219)	87(213)	482(216)
C11	4447(126)	-13912(129)	21626(122)	885(114)	888(92)	1006(122)	-468(232)	118(218)	508(240)
C12	3074(136)	-15748(125)	13142(119)	1092(118)	841(115)	804(90)	-239(219)	-116(220)	-4(225)
C13	12284(128)	-13639(124)	9311(104)	1078(110)	874(109)	812(108)	0(250)	-282(208)	-197(218)
C14	19927(123)	-10434(115)	13291(102)	970(133)	814(90)	560(86)	181(218)	280(200)	190(217)
C15	36584(122)	8405(120)	33888(102)	929(114)	839(116)	565(83)	-16(270)	-47(215)	276(216)
C16	45436(106)	3753(109)	33300(99)	614(93)	743(100)	606(84)	145(220)	-177(216)	17(233)
C17	48996(118)	84(114)	40175(105)	839(110)	777(103)	685(100)	4(236)	-271(234)	417(216)
C18	56988(127)	-3774(125)	39988(115)	903(109)	907(121)	819(102)	133(240)	-362(216)	-139(234)
C19	61738(118)	-4671(130)	32706(112)	710(113)	1051(133)	762(92)	626(216)	151(218)	197(218)
C20	58227(119)	-1136(135)	25999(117)	761(114)	1148(127)	812(102)	503(236)	-282(227)	508(223)
C21	30092(123)	2978(124)	26288(113)	769(89)	928(122)	668(104)	235(232)	4(235)	122(218)
C22	33383(97)	19734(90)	-6743(82)	888(101)	779(82)	522(61)	302(204)	-58(217)	-18(133)
C23	49600(91)	28215(85)	-9357(84)	698(87)	625(72)	632(70)	-11(210)	64(225)	-108(140)
C24	40950(95)	29545(88)	-10886(82)	810(89)	679(74)	603(83)	21(214)	-60(230)	231(227)
C25	37751(99)	37213(99)	-13153(100)	767(100)	759(94)	928(87)	37(216)	-19(227)	-12(236)
C26	43183(109)	43732(99)	-13890(98)	995(113)	732(89)	831(76)	394(198)	76(196)	14(214)
C27	52121(106)	42568(90)	-12279(94)	1020(108)	605(87)	763(79)	-34(247)	27(218)	94(236)
C28	35085(90)	35054(84)	-10271(80)	762(78)	581(67)	680(72)	-73(222)	285(239)	381(144)
C29	57603(108)	26443(92)	8975(90)	1048(123)	700(80)	637(68)	151(232)	166(215)	138(139)
C30	58409(99)	25910(92)	18201(89)	874(97)	638(76)	685(104)	-217(210)	-42(298)	84(230)
C31	65643(106)	23293(107)	22254(103)	931(118)	869(89)	955(103)	147(214)	-686(167)	-293(214)
C32	65735(134)	22716(116)	30736(103)	1550(154)	964(96)	888(99)	-83(246)	-1036(246)	-176(233)
C33	58318(160)	24432(126)	35033(105)	2116(189)	1075(117)	710(103)	-383(215)	-663(213)	198(205)
C34	51347(127)	26861(124)	31244(97)	1331(138)	1194(110)	621(97)	-365(232)	-100(217)	31(218)
C35	30847(121)	27453(108)	23313(102)	1100(87)	889(66)	787(77)	87(219)	-301(197)	-75(186)
C36	61671(93)	9578(88)	4905(78)	746(186)	708(109)	544(89)	-37(236)	-2(245)	222(256)
C37	60590(94)	2153(81)	-427(81)	750(80)	520(77)	623(109)	162(135)	39(245)	-65(236)
C38	65989(123)	876(92)	-7211(103)	1448(129)	606(89)	870(93)	117(214)	519(236)	-292(219)
C39	64388(158)	-5172(114)	-12459(118)	2164(223)	785(87)	1032(108)	-342(325)	841(346)	-420(228)
C40	57932(132)	-10888(106)	-10913(115)	1979(148)	730(86)	1064(108)	298(112)	-145(248)	-739(227)
C41	52642(119)	-9914(105)	-4477(128)	1074(138)	729(114)	1303(129)	-149(245)	-231(219)	-477(247)
C42	54143(112)	-3818(95)	716(114)	1000(148)	600(97)	1240(114)	-99(237)	-499(185)	-199(198)

* Positional and Thermal Parameters $\times 10^5$.

THE FORM OF THE ANISOTROPIC THERMAL PARAMETER IS:
 $\text{EXP}[-(h^2\sigma_{11}^2 + k^2\sigma_{22}^2 + l^2\sigma_{33}^2 + 2hk\sigma_{12} + 2hl\sigma_{13} + 2kl\sigma_{23})]$

TABELA II - Parâmetros posicionais e de vibração térmica isotrópica ($\times 10^5$) dos hidrogênios do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$ e respectivos desvios padrão.

ATOM	X	Y	Z	B	ATOM	X	Y	Z	B
H1	16630(0)	6224(0)	36080(0)	680000(0)	H22	49744(0)	15244(0)	-9500(0)	850000(0)
H2	13150(0)	9425(0)	27230(0)	700000(0)	H23	59545(0)	19513(0)	-9030(0)	650000(0)
H3	18122(0)	24469(0)	22601(0)	850000(0)	H24	36571(0)	24468(0)	-10396(0)	650000(0)
H4	20857(0)	38338(0)	26519(0)	850000(0)	H25	31239(0)	38359(0)	-13924(0)	850000(0)
H5	22699(0)	41242(0)	40686(0)	850000(0)	H26	41120(0)	49557(0)	-16003(0)	850000(0)
H6	24051(0)	29543(0)	50363(0)	850000(0)	H27	56597(0)	47615(0)	-12530(0)	850000(0)
H7	20323(0)	15786(0)	46063(0)	850000(0)	H28	61579(0)	33936(0)	-9165(0)	850000(0)
H8	27840(0)	-7672(0)	31777(0)	690000(0)	H29	53624(0)	31548(0)	7576(0)	650000(0)
H9	33084(0)	-7450(0)	23126(0)	720000(0)	H30	63753(0)	28127(0)	6699(0)	650000(0)
H10	10014(0)	-10001(0)	31521(0)	850000(0)	H31	71582(0)	22559(0)	18931(0)	850000(0)
H11	-1107(0)	-15082(0)	24701(0)	850000(0)	H32	71620(0)	20476(0)	33390(0)	850000(0)
H12	35(0)	-18593(0)	10203(0)	850000(0)	H33	59198(0)	23419(0)	41118(0)	850000(0)
H13	12541(0)	-14418(0)	3333(0)	850000(0)	H34	45839(0)	28615(0)	34958(0)	850000(0)
H14	25655(0)	-9322(0)	10255(0)	850000(0)	H35	44848(0)	28967(0)	20231(0)	850000(0)
H15	33941(0)	6978(0)	39445(0)	690000(0)	H36	62218(0)	7906(0)	10982(0)	650000(0)
H16	37626(0)	14452(0)	33559(0)	720000(0)	H37	67870(0)	11864(0)	3460(0)	650000(0)
H17	45559(0)	264(0)	45402(0)	850000(0)	H38	70710(0)	5251(0)	-8450(0)	850000(0)
H18	59747(0)	-5991(0)	45070(0)	850000(0)	H39	68782(0)	-5888(0)	-17339(0)	850000(0)
H19	67301(0)	-7890(0)	32483(0)	850000(0)	H40	57014(0)	-15352(0)	-15359(0)	850000(0)
H20	61601(0)	-1268(0)	20847(0)	850000(0)	H41	47424(0)	-14243(0)	-3981(0)	850000(0)
H21	47490(0)	5330(0)	21224(0)	850000(0)	H42	49720(0)	-3158(0)	5662(0)	850000(0)

* Positional and Thermal Parameters $\times 10^5$

TABELA III - Distâncias e ângulos intramoleculares com seus respectivos desvios padrão para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$

At.1	At.2	At.3	d 12	d 23	Angle	At.1	At.2	At.3	d 12	d 23	Angle
C11	Co	C12	2.255(3)	2.249(3)	113.0(1)	C14	C9	C10	1.420(12)	1.322(13)	119.5(10)
C11	Co	O1	2.255(3)	1.937(7)	110.6(2)	P1	C15	C16	1.824(11)	1.534(13)	116.9(7)
C11	Co	O2	2.255(3)	1.920(6)	109.1(2)	C15	C16	C17	1.534(13)	1.384(12)	118.8(9)
C12	Co	O1	2.249(3)	1.937(7)	109.6(2)	C15	C16	C21	1.534(13)	1.360(13)	123.9(9)
C12	Co	O2	2.249(3)	1.920(6)	109.2(2)	C16	C17	C18	1.384(12)	1.357(14)	121.3(10)
O1	Co	O2	1.937(7)	1.920(6)	104.9(3)	C17	C18	C19	1.357(14)	1.407(14)	121.4(10)
Co	O1	P1	1.937(7)	1.517(7)	176.0(8)	C18	C19	C20	1.407(14)	1.351(13)	117.1(10)
Co	O2	P2	1.920(6)	1.507(7)	153.0(8)	C19	C20	C21	1.351(13)	1.394(14)	121.0(11)
O1	P1	C1	1.517(7)	1.808(11)	113.6(5)	C20	C21	C16	1.360(13)	1.394(14)	121.9(10)
O1	P1	C8	1.517(7)	1.819(12)	109.4(5)	C21	C16	C17	1.360(13)	1.384(12)	117.1(9)
O1	P1	C15	1.517(7)	1.824(11)	114.5(5)	P2	C22	C23	1.795(9)	1.527(12)	116.9(6)
C1	P1	C8	1.808(11)	1.819(12)	110.3(5)	C22	C23	C24	1.527(12)	1.353(12)	123.8(9)
C1	P1	C15	1.808(11)	1.824(11)	102.0(5)	C22	C23	C28	1.527(12)	1.383(11)	119.9(8)
C8	P1	C15	1.819(12)	1.824(11)	106.5(5)	C23	C24	C25	1.353(12)	1.361(12)	122.5(9)
O2	P2	C22	1.505(7)	1.795(3)	113.3(3)	C24	C25	C26	1.361(12)	1.335(13)	120.1(9)
O2	P2	C29	1.505(7)	1.748(3)	111.3(3)	C25	C26	C27	1.335(13)	1.395(14)	118.4(10)
O2	P2	C36	1.505(7)	1.756(3)	109.3(3)	C26	C27	C28	1.395(14)	1.312(12)	120.5(10)
C22	P2	C29	1.795(3)	1.748(3)	109.5(1)	C27	C28	C23	1.312(12)	1.383(11)	122.1(9)
C22	P2	C36	1.795(3)	1.756(3)	104.9(1)	C28	C23	C24	1.383(11)	1.353(12)	116.3(9)
C29	P2	C36	1.748(3)	1.756(3)	108.2(2)	P2	C29	C30	1.748(10)	1.525(12)	117.1(7)
P1	C1	C2	1.808(11)	1.479(13)	113.1(8)	C29	C30	C31	1.525(12)	1.348(13)	124.8(11)
C1	C2	C3	1.479(13)	1.449(13)	124.2(9)	C29	C30	C35	1.525(12)	1.440(14)	120.6(10)
C1	C2	C7	1.479(13)	1.356(13)	120.5(10)	C30	C31	C32	1.348(13)	1.405(15)	122.1(12)
C2	C3	C4	1.449(13)	1.345(15)	125.6(10)	C31	C32	C33	1.405(15)	1.356(18)	119.2(12)
C3	C4	C5	1.345(15)	1.353(16)	116.6(12)	C32	C33	C34	1.356(18)	1.308(17)	119.8(11)
C4	C5	C6	1.353(16)	1.470(17)	122.0(11)	C33	C34	C35	1.308(17)	1.321(14)	122.4(14)
C5	C6	C7	1.47(17)	1.370(15)	116.9(10)	C34	C35	C30	1.321(14)	1.440(14)	121.8(12)
C6	C7	C2	1.370(15)	1.356(13)	123.7(12)	C35	C30	C31	1.440(14)	1.348(13)	114.4(9)
C7	C2	C3	1.356(13)	1.449(13)	115.0(10)	P2	C36	C37	1.756(9)	1.493(11)	115.8(6)
P1	C8	C9	1.819(12)	1.529(14)	112.6(8)	C36	C37	C38	1.493(11)	1.379(12)	122.4(9)
C8	C9	C10	1.529(14)	1.322(13)	122.3(9)	C36	C37	C42	1.493(11)	1.393(13)	122.5(9)
C8	C9	C14	1.529(14)	1.420(12)	118.0(9)	C37	C38	C39	1.379(12)	1.310(14)	123.8(12)
C9	C10	C11	1.322(13)	1.432(14)	121.5(10)	C38	C39	C40	1.310(14)	1.345(17)	119.1(13)
C10	C11	C12	1.432(14)	1.429(15)	118.7(10)	C39	C40	C41	1.345(17)	1.319(17)	119.9(12)
C11	C12	C13	1.429(15)	1.306(14)	118.5(11)	C40	C41	C42	1.319(17)	1.331(14)	122.3(13)
C12	C13	C14	1.306(14)	1.424(14)	123.1(10)	C41	C42	C37	1.331(14)	1.393(13)	119.7(12)
C13	C14	C9	1.424(14)	1.420(12)	118.1(10)	C42	C37	C38	1.493(11)	1.379(12)	115.0(9)

TABELA IV - Equações dos planos dos radicais benzílicos, coordenadas ortogonais absolutas, desvios padrão e distância dos átomos aos planos no $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$.

THE EQUATION OF THE PLANE IS OF THE FORM: $AX + BY + CZ = D$ & P

WHERE A, B, C & D ARE CONSTANTS AND X, Y & Z ARE ORTHOGONALIZED COORDINATES.

PLANE NO.	A	B	C	D	ATOM	X	Y	Z	DISTANCE	STD
-----	-	-	-	-	----	-	-	-	-----	---
1	0.9045	-0.1090	-0.1370	1.7909	-----ATOMS IN PLANE-----					
					C1	2.7557	1.5567	5.1669	0.039	0.014
					C2	2.8090	2.9619	5.8006	-0.044	0.017
					C3	2.9250	4.0990	6.7183	-0.011	0.010
					C4	3.1811	5.1750	6.8790	0.013	0.022
					C5	3.3443	5.6075	6.3885	0.002	0.022
					C6	3.3779	4.5177	7.3745	0.004	0.022
					C7	3.1242	3.2533	6.9110	-0.024	0.010
					-----OTHER ATOMS-----					
					O1	4.4948	1.0755	2.9922	2.061	0.012
					P1	4.2524	0.9150	4.3006	1.691	0.005
					C8	4.1942	-0.9007	4.2076	1.844	0.010
					C15	5.5363	1.3360	5.6052	2.741	0.010
2	-0.3236	0.9306	-0.1709	-2.9037	-----ATOMS IN PLANE-----					
					C8	4.1942	-0.9007	4.2076	-0.027	0.019
					C9	2.9415	-1.4183	3.5097	0.150	0.016
					C10	1.0256	-1.6962	4.2412	0.009	0.020
					C11	0.6734	-2.7129	3.5006	0.017	0.020
					C12	0.7678	-2.5049	2.1707	-0.047	0.020
					C13	1.0590	-2.1695	1.5355	0.021	0.020
					C14	3.0156	-1.0596	2.1920	0.009	0.010
					-----OTHER ATOMS-----					
					O1	4.4948	1.0755	2.9922	2.314	0.012
					P1	4.2524	0.9150	4.3006	1.630	0.005
					C1	2.7557	1.5567	5.1669	2.577	0.016
					C15	5.5363	1.3360	5.6052	1.590	0.019
3	-0.4700	-0.0569	-0.2009	-0.0044	-----ATOMS IN PLANE-----					
					C15	5.5363	1.3360	5.6052	-0.015	0.019
					C16	0.2750	0.5760	5.4916	0.006	0.017
					C17	7.0140	0.0134	0.6257	0.023	0.014
					C14	0.0240	-0.6770	0.5008	-0.010	0.020
					C19	9.3429	-0.7436	5.3935	0.005	0.020
					C20	0.0115	-0.1776	4.2677	-0.007	0.021
					C21	7.5003	0.4737	4.5554	0.010	0.019
					-----OTHER ATOMS-----					
					O1	4.4948	1.0755	2.9922	0.604	0.012
					P1	4.2524	0.9150	4.3006	1.202	0.005
					C1	2.7557	1.5567	5.1669	1.204	0.017
					C8	4.1942	-0.9007	4.2076	2.002	0.019
4	0.1000	-0.2347	-0.9606	1.5030	-----ATOMS IN PLANE-----					
					C22	0.2705	3.1307	-1.1122	-0.000	0.014
					C23	7.5000	4.0075	-1.5035	0.001	0.014
					C24	0.1469	4.0991	-1.7955	0.001	0.014
					C25	5.7128	5.9147	-2.1000	0.002	0.010
					C26	4.5359	6.9550	-2.2000	-0.002	0.010
					C27	7.0075	6.7704	-2.0252	-0.013	0.015
					C28	0.3359	5.5754	-1.6940	0.016	0.013
					-----OTHER ATOMS-----					
					O2	6.0277	2.3266	1.2003	-2.226	0.011
					P2	0.1417	2.7900	0.6392	-1.002	0.005
					C29	0.7170	4.2050	1.4002	-0.655	0.015
					C30	9.3327	1.5234	0.0009	-1.209	0.013
5	-0.2009	-0.0552	-0.0645	-0.0495	-----ATOMS IN PLANE-----					
					C29	0.7170	4.2050	1.4002	0.010	0.015
					C30	0.0300	4.1210	3.0217	-0.034	0.015
					C31	9.0334	3.7047	3.0721	0.000	0.017
					C32	9.0477	3.0150	5.0719	-0.005	0.010
					C33	0.0253	3.0050	5.7777	0.014	0.020
					C34	7.7704	4.2725	5.1520	-0.009	0.020
					C35	7.0946	4.3643	3.0000	0.004	0.017
					-----OTHER ATOMS-----					
					O2	6.0277	2.3266	1.2003	2.377	0.011
					P2	0.1417	2.7900	0.6392	1.503	0.005
					C22	0.2705	3.1307	-1.1122	1.309	0.014
					C36	9.3327	1.5234	0.0009	2.446	0.014
6	-0.0377	0.5530	-0.5362	-5.5070	-----ATOMS IN PLANE-----					
					C36	9.3327	1.5234	0.0009	0.204	0.014
					C37	9.1691	0.3025	-0.0706	-0.633	0.014
					C38	9.0255	0.1394	-1.1094	-0.020	0.017
					C39	9.7438	-0.0227	-2.0549	0.020	0.021
					C40	0.7668	-1.7320	-1.0000	0.004	0.020
					C41	7.9663	-1.5778	-0.7305	0.031	0.019
					C42	0.1935	-0.0074	0.1100	-0.037	0.017
					-----OTHER ATOMS-----					
					O2	6.0277	2.3266	1.2003	1.076	0.011
					P2	0.1417	2.7900	0.6392	1.500	0.005
					C36	9.3327	1.5234	0.0009	0.000	0.014
					C22	0.2705	3.1307	-1.1122	2.767	0.014

TABELA V - Ângulos diedros entre os planos dos anéis
benzílicos para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$

Plano nº	Plano nº	ângulo diedro(°)
1	2	-66.6
1	3	-69.8
1	4	72.3
1	5	-80.2
1	6	-52.0
2	3	-52.4
2	4	-84.1
2	5	-38.3
2	6	35.6
3	4	71.1
3	5	14.4
3	6	-86.4
4	5	75.9
4	6	73.1
5	6	-72.0

TABELA VI - Fatores de Estrutura observados e calculados
 finais para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$

DICLORETO DE COBALTO II BIS-TRIBENZILFOSFINOXIDO

PAGE 1

M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC
0	0	4	656	620	0	4	7	247	290	0	8	6	325	306	0	13	1	140	111	1	3	7	446	505
0	0	6	1683	1699	0	4	8	196	170	0	8	7	117	90	0	13	2	86	81	1	3	8	352	369
0	0	8	544	551	0	4	9	67	93	0	8	8	306	315	1	0	3	674	579	1	3	9	576	615
0	0	12	446	421	0	4	11	233	205	0	8	9	157	143	1	0	4	1214	1146	1	3	10	253	253
0	0	14	72	48	0	4	12	60	31	0	8	10	226	198	1	0	5	972	926	1	3	11	164	197
0	1	3	1645	1522	0	4	13	197	195	0	8	11	245	303	1	0	6	533	519	1	3	12	270	290
0	1	4	660	636	0	4	14	71	52	0	8	12	151	110	1	0	7	737	742	1	3	13	122	143
0	1	5	1341	1352	0	4	15	139	127	0	8	13	79	63	1	0	8	587	609	1	3	14	246	188
0	1	6	429	469	0	5	2	886	870	0	9	1	282	304	1	0	9	254	254	1	3	15	93	78
0	1	7	1812	1721	0	5	3	117	101	0	9	2	341	345	1	0	10	861	896	1	4	0	729	665
0	1	8	181	211	0	5	4	250	273	0	9	3	502	495	1	0	11	326	367	1	4	1	1519	1409
0	1	9	272	275	0	5	5	240	274	0	9	4	316	332	1	0	12	149	152	1	4	2	899	810
0	1	10	296	304	0	5	6	113	111	0	9	5	307	320	1	0	13	130	134	1	4	3	901	900
0	1	11	215	225	0	5	7	541	591	0	9	6	64	60	1	0	14	110	115	1	4	4	314	304
0	1	13	132	132	0	5	8	350	332	0	9	10	258	226	1	1	2	832	950	1	4	5	317	362
0	1	14	285	284	0	5	9	194	188	0	9	11	204	196	1	1	3	2311	2112	1	4	6	73	89
0	2	2	500	522	0	5	12	378	363	0	10	0	600	620	1	1	4	1076	1070	1	4	7	457	503
0	2	3	1742	1643	0	5	11	86	83	0	10	1	140	204	1	1	5	799	727	1	4	8	432	478
0	2	4	1026	949	0	5	12	200	212	0	10	3	99	88	1	1	6	887	919	1	4	9	183	190
0	2	5	70	122	0	5	13	237	235	0	10	5	143	118	1	1	7	262	234	1	4	10	170	170
0	2	6	697	707	0	6	0	622	594	0	10	6	212	220	1	1	8	184	95	1	4	11	141	138
0	2	7	137	151	0	6	2	1120	1125	0	10	7	96	86	1	1	9	779	843	1	4	12	156	160
0	2	8	1894	1119	0	6	3	1245	1237	0	10	8	41	65	1	1	11	513	529	1	4	13	191	178
0	2	9	346	345	0	6	4	289	309	0	10	9	114	119	1	1	12	264	282	1	4	14	125	119
0	2	10	133	127	0	6	5	702	720	0	11	1	222	222	1	1	15	169	159	1	4	15	67	70
0	2	11	347	361	0	6	6	434	440	0	11	2	80	104	1	2	1	434	499	1	5	0	1691	1673
0	2	14	163	135	0	6	7	355	360	0	11	3	129	141	1	2	2	200	253	1	5	1	225	225
0	3	1	155	120	0	6	8	111	126	0	11	4	150	172	1	2	3	715	685	1	5	2	872	875
0	3	2	2449	2370	0	6	9	495	494	0	11	6	184	162	1	2	4	871	867	1	5	3	699	727
0	3	3	453	439	0	6	11	155	177	0	11	8	187	180	1	2	5	299	320	1	5	4	510	512
0	3	4	1047	995	0	6	12	153	146	0	11	9	123	115	1	2	6	509	490	1	5	5	281	291
0	3	5	268	256	0	7	1	382	367	0	11	10	194	183	1	2	7	562	602	1	5	6	296	321
0	3	6	381	369	0	7	2	1139	1100	0	12	1	71	90	1	2	8	461	480	1	5	7	285	298
0	3	7	438	477	0	7	3	327	320	0	12	6	169	154	1	2	9	125	143	1	5	8	271	292
0	3	8	422	433	0	7	4	662	665	0	12	7	311	296	1	2	10	216	247	1	5	9	272	279
0	3	9	323	327	0	7	6	376	409	0	12	8	78	106	1	2	11	374	370	1	5	11	141	135
0	3	11	164	180	0	7	7	136	130	0	12	9	183	181	1	2	12	146	141	1	5	12	90	95
0	3	13	126	123	0	7	8	322	312	0	13	1	146	135	1	2	13	133	123	1	5	13	42	85
0	3	14	182	150	0	7	10	255	277	0	13	2	154	140	1	2	14	166	160	1	6	0	764	781
0	3	15	99	104	0	7	12	184	157	0	13	3	98	88	1	2	15	95	104	1	6	1	501	511
0	4	0	138	93	0	7	13	149	135	0	13	5	207	162	1	3	0	478	434	1	6	2	174	191
0	4	1	661	653	0	7	14	243	202	0	13	8	89	93	1	3	1	750	611	1	6	3	386	422
0	4	2	527	523	0	8	0	75	82	0	14	0	231	166	1	3	2	662	615	1	6	4	528	532
0	4	3	676	675	0	8	1	115	95	0	14	1	124	119	1	3	3	839	764	1	6	5	725	722
0	4	4	747	745	0	8	3	383	407	0	14	2	92	74	1	3	4	777	794	1	6	6	438	439
0	4	5	578	610	0	8	4	345	366	0	14	4	160	165	1	3	5	607	570	1	6	7	641	673
0	4	6	272	265	0	8	5	626	670	0	14	6	317	272	1	3	6	380	401	1	6	8	230	233

TABELA VI - (continuação)

DICLORETO DE COBALTO II BIS-TRIBENZILFOSFINOXIO

PAGE 2

M	K	L	F088	FCALC	M	K	L	F088	FCALC	M	K	L	F088	FCALC	M	K	L	F088	FCALC	M	K	L	F088	FCALC
1	6	9	183	184	1	10	4	367	393	2	0	14	222	235	2	1	0	576	559	2	7	2	646	697
1	6	10	123	121	1	10	5	151	176	2	0	15	151	148	2	4	1	375	369	2	7	3	479	519
1	6	11	123	128	1	10	6	128	111	2	1	1	490	515	2	4	2	1091	1094	2	7	4	410	411
1	6	12	137	187	1	10	9	139	141	2	1	2	509	445	2	4	3	193	192	2	7	5	352	362
1	6	13	298	272	1	10	10	326	292	2	1	3	651	773	2	4	4	452	450	2	7	7	236	253
1	6	14	189	159	1	10	11	135	137	2	1	4	671	660	2	4	5	262	304	2	7	8	188	193
1	7	0	139	169	1	11	0	86	82	2	1	5	223	204	2	4	6	192	180	2	7	9	350	361
1	7	1	539	558	1	11	1	199	227	2	1	6	634	653	2	4	7	352	347	2	7	10	87	68
1	7	2	628	645	1	11	2	223	219	2	1	7	189	200	2	4	8	141	138	2	7	11	154	154
1	7	4	582	624	1	11	3	71	47	2	1	8	341	346	2	4	9	147	148	2	7	13	82	61
1	7	5	222	220	1	11	4	152	178	2	1	9	340	351	2	4	10	243	243	2	8	0	144	144
1	7	6	557	578	1	11	5	84	89	2	1	10	475	471	2	4	11	241	243	2	8	1	112	106
1	7	6	517	532	1	11	6	265	296	2	1	11	326	340	2	4	12	190	190	2	8	2	368	338
1	7	9	73	84	1	11	7	175	158	2	1	12	215	212	2	4	13	186	193	2	8	3	450	472
1	7	10	117	79	1	11	9	72	78	2	1	13	155	155	2	4	14	162	124	2	8	4	583	605
1	7	11	127	121	1	12	0	76	68	2	1	14	162	156	2	4	15	182	164	2	8	5	211	210
1	7	12	133	111	1	12	1	289	286	2	1	15	185	162	2	5	0	585	611	2	8	6	93	96
1	7	13	128	127	1	12	2	82	71	2	2	1	778	741	2	5	1	493	527	2	8	7	345	329
1	8	0	685	745	1	12	3	133	135	2	2	2	906	783	2	5	2	513	535	2	8	8	320	310
1	8	1	522	563	1	12	4	75	54	2	2	3	907	884	2	5	3	604	692	2	8	9	87	71
1	8	2	479	539	1	12	5	94	103	2	2	4	579	653	2	5	4	383	420	2	8	10	131	125
1	8	3	182	199	1	12	6	71	72	2	2	5	278	297	2	5	5	485	446	2	8	11	171	159
1	8	4	435	468	1	13	1	151	132	2	2	6	225	244	2	5	6	550	567	2	8	12	195	206
1	8	5	411	421	1	13	2	103	102	2	2	7	212	218	2	5	7	316	319	2	8	13	121	111
1	8	6	383	421	1	13	3	128	98	2	2	8	513	542	2	5	8	291	329	2	9	0	386	381
1	8	7	392	399	1	13	5	195	190	2	2	9	447	470	2	5	9	274	288	2	9	1	449	467
1	8	8	122	136	1	13	6	78	66	2	2	10	411	429	2	5	10	216	220	2	9	2	369	366
1	8	9	193	184	1	13	7	187	98	2	2	11	333	356	2	5	11	96	94	2	9	3	237	253
1	8	11	157	124	1	13	8	93	91	2	2	12	137	129	2	5	12	166	157	2	9	4	140	140
1	8	12	131	129	1	14	1	93	76	2	2	13	148	153	2	5	13	196	181	2	9	5	109	118
1	8	13	184	148	1	14	2	142	123	2	2	14	177	167	2	5	14	224	222	2	9	6	356	359
1	9	0	688	695	1	14	3	135	125	2	2	15	85	80	2	6	0	1826	1819	2	9	7	238	234
1	9	1	215	243	1	14	4	171	142	2	3	0	2812	2744	2	6	2	443	534	2	9	8	231	233
1	9	2	272	289	1	14	6	98	93	2	3	1	653	663	2	6	3	496	430	2	9	9	90	77
1	9	3	435	476	1	15	0	192	143	2	3	2	814	841	2	6	4	591	658	2	9	10	428	397
1	9	4	338	341	1	15	2	75	86	2	3	3	917	980	2	6	5	375	348	2	9	11	141	129
1	9	5	411	418	2	0	2	410	382	2	3	4	297	327	2	6	6	186	172	2	9	12	118	96
1	9	6	341	356	2	0	3	640	611	2	3	5	456	443	2	6	7	294	345	2	10	0	285	218
1	9	7	146	128	2	0	4	775	730	2	3	6	101	96	2	6	8	131	141	2	10	1	289	287
1	9	8	258	248	2	0	5	276	283	2	3	7	248	210	2	6	9	84	180	2	10	2	254	268
1	9	9	98	89	2	0	6	205	248	2	3	8	175	175	2	6	10	142	146	2	10	3	162	189
1	9	10	173	158	2	0	7	378	423	2	3	9	387	403	2	6	11	82	60	2	10	4	291	272
1	9	12	121	114	2	0	8	387	420	2	3	11	239	234	2	6	12	165	178	2	10	5	216	222
1	10	0	220	218	2	0	9	297	320	2	3	12	173	195	2	6	13	160	147	2	10	6	389	314
1	10	1	214	217	2	0	11	379	320	2	3	13	74	49	2	6	14	129	99	2	10	7	192	185
1	10	2	225	240	2	0	12	243	261	2	3	14	73	66	2	7	0	189	115	2	10	8	71	84
1	10	3	178	191	2	0	13	166	140	2	3	15	135	91	2	7	1	363	391	2	10	9	171	178

TABELA VI - (continuação)

DICLORETO DE COBALTO II BIS-TRIBENZILFOSFINOXIO

PAGE 3

M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC
2	10	11	158	154	3	1	6	142	151	3	4	7	225	224	3	7	13	274	233
2	11	1	147	153	3	1	7	236	249	3	4	8	257	295	3	8	0	149	156
2	11	2	122	138	3	1	8	655	690	3	4	9	352	380	3	8	1	412	431
2	11	3	174	166	3	1	9	163	157	3	4	10	284	291	3	8	2	486	524
2	11	5	188	169	3	1	10	573	583	3	4	11	349	337	3	8	3	355	376
2	11	8	143	145	3	1	11	382	389	3	4	12	142	158	3	8	4	150	154
2	11	9	67	74	3	1	13	95	75	3	4	13	72	61	3	8	5	196	209
2	12	0	86	76	3	1	14	88	60	3	4	14	89	44	3	8	6	335	336
2	12	1	203	187	3	1	15	88	78	3	5	0	315	305	3	8	7	284	274
2	12	2	186	190	3	2	0	1578	1592	3	5	1	131	154	3	8	8	142	125
2	12	3	119	131	3	2	1	832	790	3	5	3	225	235	3	8	9	84	84
2	12	4	205	204	3	2	2	415	423	3	5	4	540	541	3	8	10	121	139
2	12	5	116	131	3	2	3	747	713	3	5	5	233	249	3	8	12	233	195
2	12	7	73	63	3	2	4	604	636	3	5	7	315	297	3	8	13	79	53
2	13	0	374	356	3	2	5	389	395	3	5	8	393	409	3	9	0	423	426
2	13	1	162	143	3	2	6	644	747	3	5	9	343	342	3	9	1	72	60
2	13	2	154	145	3	2	7	303	317	3	5	10	272	274	3	9	2	219	215
2	13	3	161	153	3	2	8	258	261	3	5	11	222	217	3	9	4	478	489
2	13	6	96	82	3	2	9	388	314	3	5	13	174	167	3	9	5	181	170
2	13	8	77	68	3	2	10	283	271	3	5	14	182	184	3	9	6	189	207
2	14	0	222	169	3	2	12	245	247	3	6	0	415	424	3	9	7	141	146
2	14	1	229	185	3	2	13	159	152	3	6	1	241	253	3	9	8	181	110
2	14	2	181	158	3	2	14	173	187	3	6	2	582	629	3	9	10	194	167
2	14	3	89	87	3	2	15	119	87	3	6	3	244	218	3	9	11	62	37
2	14	4	124	99	3	3	0	1241	1217	3	6	4	396	452	3	9	12	73	70
2	14	5	147	148	3	3	1	622	576	3	6	5	166	160	3	10	0	256	249
2	15	0	79	53	3	3	2	443	419	3	6	6	415	434	3	10	1	366	342
2	15	1	130	102	3	3	3	828	807	3	6	7	362	357	3	10	2	276	241
3	0	1	202	135	3	3	4	447	461	3	6	8	420	410	3	10	3	172	155
3	0	2	313	291	3	3	5	236	271	3	6	9	195	180	3	10	4	99	107
3	0	3	489	469	3	3	6	294	302	3	6	10	278	259	3	10	5	156	155
3	0	4	119	186	3	3	7	475	471	3	6	12	183	167	3	10	6	78	81
3	0	5	165	219	3	3	8	283	286	3	6	13	137	141	3	10	7	199	181
3	0	6	62	76	3	3	9	98	117	3	6	14	102	93	3	10	8	122	95
3	0	7	299	311	3	3	10	176	176	3	7	0	532	567	3	10	9	230	207
3	0	8	228	251	3	3	11	182	185	3	7	1	493	513	3	10	10	166	161
3	0	9	537	544	3	3	12	177	158	3	7	2	225	251	3	10	11	134	110
3	0	10	391	402	3	3	13	309	291	3	7	3	184	183	3	11	0	215	232
3	0	11	434	448	3	3	14	111	92	3	7	4	136	138	3	11	1	223	236
3	0	14	184	167	3	3	15	112	87	3	7	5	188	218	3	11	2	178	172
3	0	15	123	90	3	4	0	629	658	3	7	6	381	295	3	11	3	172	167
3	1	0	2048	1911	3	4	1	525	529	3	7	7	497	518	3	11	4	92	84
3	1	1	1921	1838	3	4	2	792	747	3	7	8	224	241	3	11	5	112	116
3	1	2	1526	1416	3	4	3	541	571	3	7	9	192	186	3	11	7	120	109
3	1	3	953	939	3	4	4	476	485	3	7	10	183	122	3	11	8	251	235
3	1	4	896	915	3	4	5	381	390	3	7	11	99	96	3	11	10	71	27
3	1	5	562	598	3	4	6	187	202	3	7	12	81	70	3	12	0	351	355

TABELA VI- (continuação)

DICLOROETO DE COBALTO II BIS-TRIBENZILFOSFINOXIDOO

PAGE 4

M	K	L	F0B3	FCALC	M	K	L	F0B3	FCALC	M	K	L	F0B3	FCALC	M	K	L	F0B3	FCALC
4	2	4	429	492	4	5	7	151	138	4	8	12	86	84	5	0	3	112	44
4	2	5	372	366	4	5	8	337	334	4	9	1	492	516	5	0	4	359	367
4	2	6	172	167	4	5	9	298	304	4	9	2	248	278	5	0	5	618	663
4	2	7	696	725	4	5	10	113	98	4	9	3	195	202	5	0	6	391	423
4	2	8	443	445	4	5	11	186	193	4	9	4	328	330	5	0	7	548	537
4	2	9	96	98	4	5	12	109	99	4	9	5	244	226	5	0	8	174	148
4	2	10	385	398	4	5	13	109	98	4	9	6	175	203	5	0	9	176	154
4	2	11	129	133	4	5	14	95	66	4	9	7	137	134	5	0	11	262	252
4	2	13	169	158	4	6	8	105	127	4	9	8	118	110	5	0	12	97	94
4	2	14	88	75	4	6	1	414	425	4	9	9	74	65	5	0	14	166	153
4	2	15	65	66	4	6	2	544	573	4	9	10	102	88	5	1	0	138	95
4	3	0	295	321	4	6	3	118	154	4	10	0	100	91	5	1	1	556	539
4	3	1	268	254	4	6	4	457	475	4	10	1	213	243	5	1	2	1029	1035
4	3	2	317	308	4	6	5	228	224	4	10	2	120	114	5	1	3	133	149
4	3	3	578	552	4	6	6	287	281	4	10	3	89	90	5	1	4	253	303
4	3	4	455	487	4	6	7	120	135	4	10	4	267	269	5	1	5	121	119
4	3	5	194	216	4	6	8	261	263	4	10	5	171	162	5	1	6	305	289
4	3	6	252	226	4	6	9	62	58	4	10	6	123	118	5	1	7	262	292
4	3	7	440	523	4	6	10	186	83	4	10	7	99	81	5	1	8	269	275
4	3	8	150	184	4	6	11	129	181	4	10	8	198	191	5	1	9	412	456
4	3	9	126	98	4	6	12	107	125	4	10	10	98	93	5	1	10	213	211
4	3	10	255	271	4	6	13	135	115	4	10	11	72	74	5	1	11	288	296
4	3	11	151	145	4	7	0	154	172	4	11	0	277	287	5	1	12	178	168
4	3	12	94	127	4	7	1	474	498	4	11	1	186	196	5	1	13	83	83
4	3	13	184	182	4	7	2	229	248	4	11	2	139	138	5	1	14	70	58
4	4	0	556	569	4	7	3	780	740	4	11	3	118	101	5	2	0	1101	1090
4	4	1	716	736	4	7	4	464	502	4	11	4	91	88	5	2	1	297	300
4	4	2	266	261	4	7	5	265	267	4	11	6	172	166	5	2	2	266	284
4	4	3	469	520	4	7	6	352	334	4	11	7	268	241	5	2	3	387	372
4	4	4	369	392	4	7	8	63	84	4	11	9	94	89	5	2	4	118	137
4	4	5	335	366	4	7	9	319	297	4	12	1	106	94	5	2	5	199	211
4	4	6	536	574	4	7	10	174	173	4	12	2	147	149	5	2	6	314	322
4	4	7	426	431	4	7	11	133	122	4	12	3	113	114	5	2	7	436	454
4	4	8	238	231	4	7	12	180	156	4	12	4	181	181	5	2	8	89	94
4	4	9	240	248	4	7	13	124	112	4	12	5	127	118	5	2	9	126	112
4	4	10	178	170	4	8	0	566	621	4	12	6	113	118	5	2	11	127	124
4	4	11	231	254	4	8	1	233	250	4	12	7	104	103	5	2	12	127	118
4	4	12	158	137	4	8	2	240	244	4	12	8	110	95	5	2	13	157	126
4	4	13	67	83	4	8	3	257	237	4	13	0	102	77	5	2	14	122	122
4	4	14	147	145	4	8	4	638	648	4	13	1	106	87	5	3	0	962	995
4	5	0	180	173	4	8	5	258	261	4	13	3	121	125	5	3	1	530	546
4	5	1	343	341	4	8	6	184	125	4	13	4	106	94	5	3	2	568	645
4	5	2	371	411	4	8	7	387	382	4	13	5	68	46	5	3	3	276	334
4	5	3	147	124	4	8	8	131	160	4	13	6	196	166	5	3	4	424	458
4	5	4	382	298	4	8	9	191	190	4	14	1	98	55	5	3	5	358	363
4	5	5	272	313	4	8	10	243	288	5	0	1	264	292	5	3	6	383	318
4	5	6	419	421	4	8	11	183	188	5	0	2	181	145	5	3	7	381	386
																		319	316
																		147	159
																		315	329
																		122	123
																		179	161
																		158	159
																		77	78
																		394	308
																		751	828
																		466	466
																		569	674
																		478	512
																		182	201
																		134	149
																		124	127
																		248	247
																		277	318
																		167	168
																		123	138
																		198	188
																		98	98
																		156	195
																		383	345
																		693	763
																		283	251
																		338	328
																		395	411
																		196	182
																		186	183
																		145	145
																		138	135
																		172	152
																		246	233
																		118	125
																		45	68
																		165	152
																		151	192
																		481	435
																		611	648
																		586	586
																		237	254
																		82	78
																		212	218
																		88	184
																		192	185
																		186	123

TABELA VI - (continuação)

DICLORETO DE COBALTO II BIS-TRIDENZILFOSFINOXIDO

PAGE 5

M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC
5	6	12	121	112	5	11	1	140	114	6	1	13	164	167	6	5	7	300	326	6	9	7	250	251
5	6	13	80	76	5	11	2	193	194	6	1	10	202	171	6	5	8	180	196	6	9	8	67	84
5	7	0	159	149	5	11	3	107	95	6	2	0	104	204	6	5	9	86	64	6	9	9	153	147
5	7	1	241	235	5	11	4	193	160	6	2	1	400	472	6	5	10	64	99	6	9	10	78	71
5	7	2	124	147	5	11	5	159	141	6	2	2	396	400	6	5	11	271	192	6	10	1	143	167
5	7	3	155	150	5	11	6	109	162	6	2	3	690	749	6	5	13	126	98	6	10	2	117	134
5	7	4	293	324	5	11	7	122	110	6	2	4	569	594	6	6	0	326	360	6	10	3	171	151
5	7	5	320	357	5	11	8	101	86	6	2	5	370	342	6	6	1	226	240	6	10	4	86	88
5	7	6	139	169	5	12	0	172	160	6	2	6	66	84	6	6	2	473	466	6	10	5	274	197
5	7	7	491	496	5	12	1	147	152	6	2	7	367	393	6	6	3	156	103	6	10	6	229	205
5	7	8	86	81	5	12	3	101	83	6	2	8	198	242	6	6	4	197	174	6	12	7	103	92
5	7	9	126	130	5	12	4	130	130	6	2	9	270	264	6	6	5	120	159	6	10	8	96	74
5	7	10	110	95	5	12	5	120	88	6	2	10	331	341	6	6	6	416	444	6	10	9	143	123
5	7	11	125	117	5	12	6	81	76	6	2	11	147	130	6	6	7	80	101	6	10	10	140	123
5	7	12	103	100	5	12	7	141	111	6	2	12	144	150	6	6	8	165	172	6	11	1	159	149
5	8	0	546	506	5	13	1	67	65	6	2	13	222	204	6	6	9	221	231	6	11	2	247	291
5	8	1	139	154	5	13	4	166	150	6	3	0	776	792	6	6	10	84	66	6	11	4	230	224
5	8	2	141	139	5	13	6	104	82	6	3	1	294	256	6	6	11	131	122	6	11	5	95	73
5	8	3	450	450	5	14	0	79	84	6	3	2	410	455	6	6	12	171	154	6	11	6	132	120
5	8	4	82	50	5	14	1	110	85	6	3	3	225	245	6	7	0	134	144	6	11	7	126	110
5	8	6	400	429	5	14	3	103	100	6	3	4	652	689	6	7	2	204	236	6	12	1	127	105
5	8	7	67	61	6	0	0	290	263	6	3	5	349	366	6	7	3	440	479	6	12	3	337	313
5	8	8	239	219	6	0	1	519	523	6	3	7	322	340	6	7	4	183	171	6	12	4	83	61
5	8	9	179	190	6	0	2	109	105	6	3	8	234	255	6	7	5	76	85	6	12	5	133	112
5	8	10	302	203	6	0	3	197	197	6	3	9	302	311	6	7	7	147	153	6	12	6	153	124
5	8	11	70	96	6	0	4	74	100	6	3	10	307	304	6	7	6	269	270	6	13	1	78	73
5	8	12	175	167	6	0	5	265	320	6	3	11	151	135	6	7	9	220	211	6	13	2	110	87
5	9	0	131	124	6	0	6	335	362	6	3	12	100	100	6	7	10	202	212	6	13	3	149	123
5	9	1	279	293	6	0	7	256	260	6	3	13	81	50	6	7	11	60	46	7	0	2	491	611
5	9	2	120	112	6	0	8	429	457	6	4	0	571	594	6	7	12	166	140	7	0	4	414	459
5	9	3	233	219	6	0	9	296	291	6	4	2	413	430	6	8	0	270	272	7	0	5	277	301
5	9	4	274	204	6	0	10	116	133	6	4	3	270	273	6	8	1	172	195	7	0	7	252	269
5	9	5	159	172	6	0	11	423	396	6	4	4	167	189	6	8	2	76	63	7	0	8	435	430
5	9	6	70	100	6	0	12	70	60	6	4	5	131	140	6	8	3	139	134	7	0	9	62	89
5	9	7	105	110	6	0	13	93	82	6	4	6	206	210	6	8	4	230	227	7	0	10	106	177
5	9	8	146	137	6	0	14	150	119	6	4	7	176	95	6	8	5	60	94	7	0	11	226	205
5	9	9	105	172	6	1	0	131	156	6	4	8	329	330	6	8	6	104	195	7	0	12	113	120
5	9	11	105	87	6	1	1	446	427	6	4	9	240	255	6	8	7	297	304	7	1	0	672	661
5	10	0	100	121	6	1	2	109	205	6	4	11	279	244	6	8	8	82	96	7	1	1	323	346
5	10	1	151	155	6	1	4	264	272	6	4	12	221	206	6	8	10	121	120	7	1	2	635	692
5	10	2	170	162	6	1	5	427	476	6	5	0	519	572	6	8	11	103	111	7	1	3	470	490
5	10	3	102	121	6	1	6	209	269	6	5	1	770	822	6	9	0	227	214	7	1	4	495	527
5	10	4	160	165	6	1	7	202	260	6	5	2	221	245	6	9	1	250	242	7	1	5	94	191
5	10	5	271	265	6	1	8	154	146	6	5	3	216	255	6	9	2	222	230	7	1	6	194	100
5	10	6	99	90	6	1	9	232	210	6	5	4	330	363	6	9	3	133	120	7	1	7	334	352
5	10	7	130	122	6	1	11	290	310	6	5	5	411	453	6	9	5	153	161	7	1	8	235	241
5	10	9	70	55	6	1	12	139	133	6	5	6	100	130	6	9	6	100	92	7	1	9	361	373

TABELA VI - (continuação)

DICLOMETO DE COBALTO II BIS-TRIBENZILFOSFINOXIDO

PAGE 6

M	K	L	FORB	FCALC	M	K	L	FORB	FCALC	M	K	L	FORB	FCALC	M	K	L	FORB	FCALC
7	1	10	274	270	7	5	3	397	426	7	9	5	173	192	8	1	6	98	184
7	1	11	258	256	7	5	4	186	194	7	9	9	216	179	8	1	9	228	228
7	1	12	126	111	7	5	5	222	243	7	9	10	69	81	8	1	10	112	98
7	1	13	146	138	7	5	7	244	239	7	10	0	235	221	8	1	11	177	167
7	2	0	212	242	7	5	8	225	235	7	10	1	330	313	8	1	12	163	153
7	2	1	523	526	7	5	9	416	409	7	10	2	161	138	8	2	0	228	239
7	2	2	156	145	7	5	10	284	262	7	10	3	199	195	8	2	1	293	318
7	2	3	559	606	7	5	11	285	248	7	10	4	187	153	8	2	2	196	194
7	2	4	226	257	7	5	12	147	160	7	10	6	160	166	8	2	3	450	471
7	2	5	598	633	7	6	1	405	432	7	10	7	127	123	8	2	4	244	244
7	2	6	268	283	7	6	2	89	101	7	10	8	141	132	8	2	5	294	327
7	2	7	435	436	7	6	3	185	123	7	10	9	87	55	8	2	6	147	147
7	2	8	131	119	7	6	4	290	279	7	11	0	243	243	8	2	7	247	251
7	2	9	67	86	7	6	5	251	273	7	11	1	100	83	8	2	8	266	282
7	2	10	164	173	7	6	6	146	153	7	11	2	258	231	8	2	9	273	264
7	2	11	253	233	7	6	7	272	271	7	11	3	116	117	8	2	10	133	134
7	2	12	146	146	7	6	8	318	328	7	11	4	95	81	8	2	11	275	266
7	2	13	221	191	7	6	9	208	212	7	11	6	176	151	8	2	12	123	106
7	3	0	471	526	7	6	10	272	243	7	11	7	75	68	8	2	13	141	127
7	3	1	257	251	7	6	11	102	76	7	12	1	241	210	8	3	1	127	165
7	3	2	256	268	7	6	12	122	98	7	12	2	86	69	8	3	2	392	407
7	3	3	404	440	7	7	0	444	458	7	12	4	139	122	8	3	4	347	371
7	3	4	550	559	7	7	1	84	79	7	12	5	171	145	8	3	5	338	338
7	3	5	331	295	7	7	2	253	246	7	12	6	81	67	8	3	6	246	254
7	3	6	541	545	7	7	4	112	118	7	13	0	167	158	8	3	7	312	305
7	3	8	149	158	7	7	5	105	126	7	13	1	68	62	8	3	8	275	262
7	3	9	138	135	7	7	6	257	271	7	13	2	126	113	8	3	9	285	209
7	3	10	135	114	7	7	7	188	182	7	13	3	281	182	8	3	10	136	114
7	3	11	91	89	7	7	9	117	116	8	0	0	506	554	8	3	11	276	256
7	3	12	231	193	7	7	11	116	113	8	0	1	690	744	8	3	12	101	44
7	4	0	328	345	7	8	0	93	107	8	0	3	142	121	8	4	0	468	527
7	4	1	183	168	7	8	1	173	183	8	0	4	255	288	8	4	1	342	349
7	4	2	675	721	7	8	2	225	223	8	0	6	131	121	8	4	2	235	256
7	4	3	334	346	7	8	3	219	224	8	0	7	175	171	8	4	3	319	317
7	4	4	378	412	7	8	4	173	159	8	0	8	310	337	8	4	4	126	114
7	4	5	221	251	7	8	5	147	136	8	0	9	162	163	8	4	5	424	402
7	4	6	117	118	7	8	6	74	85	8	0	10	86	94	8	4	6	333	316
7	4	7	263	212	7	8	7	228	219	8	0	11	79	67	8	4	7	279	308
7	4	8	247	240	7	8	8	83	89	8	0	13	196	169	8	4	8	256	244
7	4	9	125	135	7	8	9	67	64	8	1	0	166	199	8	4	9	92	101
7	4	10	175	179	7	8	10	129	184	8	1	1	215	226	8	4	10	328	311
7	4	11	184	175	7	8	11	138	139	8	1	2	321	321	8	4	12	134	140
7	4	12	175	166	7	9	0	195	196	8	1	3	493	514	8	5	0	596	497
7	4	13	153	114	7	9	1	151	129	8	1	4	283	278	8	5	1	467	481
7	5	0	175	185	7	9	2	132	128	8	1	5	288	258	8	5	2	133	136
7	5	1	248	282	7	9	3	346	327	8	1	6	125	138	8	5	3	238	242
7	5	2	77	93	7	9	4	151	173	8	1	7	284	219	8	5	4	183	186

TABELA VI - (continuação)

DICLOMETO DE COBALTO II BIS-TRIBENZILFOSFINOXIDO

PAGE 7

M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC
8	10	4	225	205	9	3	1	556	592	9	7	6	103	144	10	2	2	453	446	10	7	1	118	129
8	10	5	133	117	9	3	2	278	282	9	7	9	159	135	10	2	3	162	163	10	7	2	148	142
8	10	6	203	190	9	3	3	252	247	9	7	10	69	72	10	2	4	337	352	10	7	3	66	66
8	10	7	237	201	9	3	4	240	250	9	8	1	199	197	10	2	5	66	74	10	7	4	147	151
8	10	8	66	56	9	3	5	273	287	9	8	2	80	50	10	2	6	253	247	10	7	5	66	73
8	11	1	120	111	9	3	6	239	226	9	8	3	90	90	10	2	7	125	131	10	7	6	73	72
8	11	2	99	58	9	3	7	195	178	9	8	4	78	60	10	2	10	114	124	10	7	7	72	56
8	11	3	280	238	9	3	8	184	190	9	8	5	143	135	10	3	1	227	256	10	8	2	81	84
8	11	4	219	177	9	3	9	202	176	9	8	6	168	141	10	3	2	189	184	10	8	3	191	218
8	11	5	105	84	9	3	10	77	70	9	8	7	177	174	10	3	3	257	277	10	8	4	70	64
8	11	6	90	77	9	3	11	137	117	9	9	1	110	91	10	3	4	271	278	10	8	5	73	65
8	12	1	71	48	9	3	12	137	109	9	9	2	123	115	10	3	5	389	340	10	8	6	83	94
8	12	2	188	157	9	4	0	758	780	9	9	3	197	185	10	3	6	207	213	10	9	1	80	76
8	12	3	155	135	9	4	1	374	387	9	9	4	120	123	10	3	7	134	133	10	9	2	127	114
8	12	4	138	106	9	4	2	305	313	9	9	5	166	158	10	3	8	157	164	10	9	3	87	89
9	0	1	105	115	9	4	3	376	379	9	9	6	123	142	10	3	9	161	161	10	9	4	65	48
9	0	2	673	644	9	4	4	220	247	9	10	0	211	176	10	3	10	64	59	10	9	5	107	96
9	0	3	178	185	9	4	5	324	329	9	10	1	340	266	10	3	11	160	114	10	9	6	134	117
9	0	4	140	144	9	4	6	281	299	9	10	2	139	136	10	4	0	153	131	10	10	0	132	135
9	0	5	128	106	9	4	7	162	166	9	10	3	97	68	10	4	1	378	393	10	10	1	72	44
9	0	6	118	98	9	4	8	134	124	9	10	4	141	108	10	4	2	115	97	10	10	2	70	60
9	0	7	89	100	9	4	9	104	102	9	11	0	150	124	10	4	3	98	115	10	10	3	118	93
9	0	8	144	149	9	4	10	240	205	9	11	1	93	73	10	4	4	241	244	10	10	4	136	111
9	0	9	76	67	9	4	11	223	221	9	11	2	109	79	10	4	5	260	262	10	11	0	67	79
9	0	10	70	55	9	5	1	378	378	9	11	3	131	99	10	4	6	77	90	11	0	1	66	49
9	0	11	137	155	9	5	2	303	325	9	11	4	151	127	10	4	7	295	282	11	0	2	168	171
9	1	0	270	302	9	5	3	298	294	10	0	0	151	178	10	4	8	64	76	11	0	3	164	163
9	1	1	225	233	9	5	4	76	78	10	0	1	310	323	10	4	9	220	196	11	0	4	221	231
9	1	2	122	146	9	5	5	87	66	10	0	2	358	369	10	4	10	153	120	11	0	5	107	114
9	1	3	135	135	9	5	6	135	149	10	0	3	82	81	10	5	0	561	560	11	0	6	139	146
9	1	4	308	306	9	5	7	85	92	10	0	4	239	238	10	5	1	157	159	11	0	7	106	85
9	1	5	82	99	9	5	8	299	281	10	0	5	76	82	10	5	2	218	217	11	0	8	147	134
9	1	6	344	382	9	5	9	92	83	10	0	6	70	78	10	5	3	92	65	11	0	9	63	51
9	1	7	180	180	9	5	10	158	138	10	0	7	76	100	10	5	4	235	224	11	1	0	89	87
9	1	8	170	190	9	6	0	232	213	10	1	0	197	200	10	5	5	109	131	11	1	1	259	239
9	2	0	358	344	9	6	1	124	131	10	1	1	261	265	10	5	6	214	209	11	1	2	258	242
9	2	1	387	392	9	6	2	180	182	10	1	2	431	448	10	5	7	110	91	11	1	3	151	165
9	2	2	93	99	9	6	3	260	252	10	1	3	110	100	10	5	8	77	72	11	1	4	132	146
9	2	3	258	285	9	6	4	229	235	10	1	4	110	115	10	5	9	206	224	11	1	5	78	72
9	2	4	147	164	9	6	5	144	128	10	1	5	171	154	10	6	0	243	279	11	1	6	150	123
9	2	5	255	261	9	6	6	89	104	10	1	6	166	172	10	6	1	175	175	11	1	7	139	118
9	2	6	244	227	9	6	7	132	114	10	1	7	93	91	10	6	2	119	123	11	1	8	73	68
9	2	7	301	292	9	6	8	208	198	10	1	8	107	83	10	6	3	132	121	11	1	9	101	100
9	2	8	166	162	9	7	0	122	114	10	1	9	88	82	10	6	4	206	207	11	2	0	223	227
9	2	9	118	103	9	7	1	129	139	10	1	10	88	79	10	6	5	123	115	11	2	1	183	133
9	2	10	95	84	9	7	2	190	186	10	2	0	72	122	10	6	6	85	80	11	2	2	204	193
9	3	0	425	441	9	7	3	158	151	10	2	1	102	106	10	7	0	188	198	11	2	3	149	158

TABELA VI - (continuação)

DICLORETO DE COBALTO II BIS-TRIBENZILFOSFINOXIDO

PAGE 6

M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC
11	2	5	123	133	11	9	4	149	133	12	8	8	221	191	14	1	4	140	123					
11	2	6	211	192	11	10	0	205	170	12	8	3	66	55	14	2	0	91	75					
11	2	7	114	101	12	0	0	229	211	13	0	1	189	188	14	2	1	77	76					
11	2	8	120	117	12	0	1	82	86	13	0	2	129	116	14	2	2	66	41					
11	2	10	94	83	12	0	3	235	226	13	0	3	208	191	14	2	3	265	220					
11	3	0	244	226	12	0	4	144	130	13	0	4	115	104	14	3	0	95	87					
11	3	1	164	162	12	0	6	169	166	13	0	6	75	67	14	3	1	80	69					
11	3	2	203	274	12	0	7	111	92	13	0	7	212	191	14	3	2	142	116					
11	3	3	150	134	12	1	0	78	76	13	1	1	104	114	14	4	0	256	216					
11	3	4	158	154	12	1	1	115	131	13	1	2	145	139	14	4	1	120	108					
11	3	5	211	206	12	1	3	249	226	13	1	3	130	114										
11	3	6	210	192	12	1	4	78	82	13	1	4	127	133										
11	3	7	117	117	12	1	5	116	103	13	1	6	123	93										
11	4	1	191	208	12	1	7	184	98	13	1	7	85	78										
11	4	2	67	74	12	2	0	64	70	13	2	0	196	183										
11	4	3	260	247	12	2	2	240	216	13	2	1	167	146										
11	4	4	66	81	12	2	4	92	74	13	2	2	93	84										
11	4	5	185	156	12	2	7	146	130	13	2	3	72	47										
11	4	6	91	73	12	2	8	115	128	13	2	5	134	130										
11	4	7	105	88	12	3	1	120	128	13	2	6	72	79										
11	4	9	171	143	12	3	3	96	71	13	3	0	153	134										
11	5	0	67	66	12	3	4	125	132	13	3	1	195	166										
11	5	1	176	178	12	3	5	109	95	13	3	2	115	97										
11	5	2	113	107	12	3	6	122	97	13	3	3	173	148										
11	5	3	91	75	12	3	7	95	94	13	3	4	78	59										
11	5	4	210	226	12	3	8	200	189	13	3	6	137	131										
11	5	5	82	77	12	4	0	140	139	13	4	0	194	152										
11	5	6	100	111	12	4	1	199	176	13	4	1	80	68										
11	5	8	159	134	12	4	2	143	150	13	4	2	181	156										
11	6	0	215	218	12	4	4	131	106	13	4	3	109	80										
11	6	1	184	187	12	4	5	96	83	13	4	4	163	137										
11	6	2	176	169	12	4	6	66	73	13	4	5	153	137										
11	6	5	115	122	12	4	7	147	119	13	5	1	239	249										
11	6	6	82	74	12	5	0	291	254	13	5	2	119	95										
11	6	7	200	188	12	5	1	92	109	13	5	3	91	55										
11	7	0	166	177	12	5	2	100	79	13	5	4	135	118										
11	7	1	169	170	12	5	3	108	87	13	6	1	127	115										
11	7	3	132	118	12	5	6	179	143	13	6	2	92	66										
11	7	6	71	76	12	5	7	78	90	13	6	3	79	58										
11	8	1	221	197	12	6	1	150	137	14	0	0	147	114										
11	8	4	72	69	12	6	2	99	73	14	0	1	125	107										
11	8	5	107	104	12	6	3	143	137	14	0	2	245	213										
11	8	6	74	77	12	6	6	120	99	14	0	3	79	66										
11	9	0	61	48	12	7	0	81	78	14	1	0	67	38										
11	9	1	73	79	12	7	1	129	120	14	1	1	185	159										
11	9	2	111	91	12	7	3	76	65	14	1	2	160	146										
11	9	3	182	164	12	7	4	79	70	14	1	3	87	72										

TABELA VII - Análise da configuração em torno do íon
Co(II) no $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tbpo}$

THE EQUATION OF THE PLANE IS OF THE FORM: $AX + BY + CZ = D = 0$

WHERE A, B, C & D ARE CONSTANTS AND X, Y & Z ARE ORTHOGONALIZED COORDINATES.

PLANE NO.	A	B	C	D	ATOM	X	Y	Z
-----	-	-	-	-	----	-	-	-
1	0,7750	0,2653	-0,5736	3,6765	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	4,9097	2,2727	1,2755
					CL1	4,1076	4,3774	1,1652
					CL2	4,1412	0,9514	-0,3742
2	-0,0422	-0,3479	-0,3683	-5,4934	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	4,9097	2,2727	1,2755
					CL1	4,1076	4,3774	1,1652
					O1	4,4960	1,4755	2,9922
3	0,0752	-0,4870	-0,0167	3,1591	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	4,9097	2,2727	1,2755
					CL2	4,1412	0,9514	-0,3742
					O1	4,4960	1,4755	2,9922
4	0,0092	-0,9278	-0,4194	-2,5537	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	4,9097	2,2727	1,2755
					O1	4,4960	1,4755	2,9922
					O2	6,0277	2,3266	1,2003
5	-0,0372	-0,2664	-0,9971	-1,6255	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	4,9097	2,2727	1,2755
					O2	6,0277	2,3266	1,2003
					CL1	4,1076	4,3774	1,1652
6	-0,4461	2,7900	-0,6113	0,7893	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	4,9097	2,2727	1,2755
					O2	6,0277	2,3266	1,2003
					CL2	4,1412	0,9514	-0,3742

DIMEDRAL ANGLES BETWEEN PLANES:

PLANE NO.	PLANE NO.	DIMEDRAL ANGLE
-----	-----	-----
1	2	-56,7
1	3	56,1
1	4	89,6
1	5	58,3
1	6	58,4
2	3	-54,7
2	4	62,5
2	5	65,0
2	6	-89,4
3	4	62,8
3	5	89,1
3	6	-65,5
4	5	61,4
4	6	-62,5
5	6	56,0

TABELA VIII - Distribuição estatística dos fatores de estrutura normalizados para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$.

STATISTICAL DISTRIBUTION OF E'S CALCULATED FROM WILSON PLOT1

QUANTITY	CALCULATED	THEORETICAL (CENTRIC)	THEORETICAL (ACENTRIC)
AVERAGE MAG OF E'S	0,831	0,798	0,886
AVERAGE OF (E)**2	0,994	1,000	1,000
AVERAGE OF ABS(E**2-1)	0,836	0,968	0,736
PERCENTAGE GREATER THAN ONE	35,83	32,00	37,00
PERCENTAGE GREATER THAN TWO	2,91	5,00	1,80
PERCENTAGE GREATER THAN THREE	0,05	0,30	0,01

STATISTICAL DISTRIBUTION OF E'S AFTER RESCALING AVG E**2 TO 1,0

TEMPERATURE FACTOR USED WAS 4,619

SCALE FACTOR USED WAS 0,992

QUANTITY	CALCULATED	THEORETICAL (CENTRIC)	THEORETICAL (ACENTRIC)
AVERAGE MAG OF E'S	0,834	0,798	0,886
AVERAGE OF (E)**2	1,000	1,000	1,000
AVERAGE OF ABS(E**2-1)	0,840	0,968	0,736
PERCENTAGE GREATER THAN ONE	36,15	32,00	37,00
PERCENTAGE GREATER THAN TWO	2,96	5,00	1,80
PERCENTAGE GREATER THAN THREE	0,05	0,30	0,01

TABELA IX - Figuras de mérito para os conjuntos de fases calculados pelo MULTAN para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$

NUMSET	ABS FOM	PSI ZERO	RES10	COMBINED FOM
1	0,7099	0,0000E 00	55,71	1,0000
2	1,2053	0,0000E 00	36,11	2,4701
3	0,7278	0,0000E 00	51,44	1,1750
4	1,4250	0,0000E 00	27,45	3,0000
5	0,7562	0,0000E 00	51,51	1,2134
6	0,7242	0,0000E 00	53,68	1,0921
7	0,8259	0,0000E 00	48,04	1,4338
8	0,8313	0,0000E 00	51,42	1,3218
9	0,8444	0,0000E 00	50,48	1,3732
10	1,1909	0,0000E 00	37,17	2,3288
11	0,7445	0,0000E 00	51,96	1,1412
12	1,0370	0,0000E 00	44,36	1,4592
13	0,7170	0,0000E 00	50,72	1,2213
14	0,6843	0,0000E 00	54,99	1,1727
15	0,6648	0,0000E 00	54,38	1,1703
16	0,6471	0,0000E 00	51,25	1,3156
17	0,7476	0,0000E 00	49,16	1,5073
18	1,2637	0,0000E 00	36,20	2,5094
19	0,8007	0,0000E 00	51,12	1,4518
20	1,4251	0,0000E 00	27,49	3,0000
21	0,7059	0,0000E 00	53,48	1,2503
22	0,8207	0,0000E 00	49,49	1,5241
23	0,8203	0,0000E 00	47,46	1,5926
24	0,7781	0,0000E 00	51,77	1,3953
25	0,8240	0,0000E 00	48,23	1,5768
26	1,1906	0,0000E 00	37,17	2,3887
27	0,7550	0,0000E 00	54,35	1,2797
28	1,0302	0,0000E 00	44,06	1,9706
29	0,7552	0,0000E 00	52,45	1,3447
30	0,7046	0,0000E 00	51,39	1,3197
31	0,8295	0,0000E 00	47,17	1,6135
32	0,5953	0,0000E 00	56,92	1,0000

TABELA X - Parâmetros posicionais e de vibração térmica e respectivos desvios padrão ($\times 10^3$) do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

ATOMO	x	y	z	B(1,1)	B(2,2)	B(3,3)	B(1,2)	B(1,3)	B(2,3)
-----	-	-	-	-----	-----	-----	-----	-----	-----
CO	0(0)	27110(27)	25000(0)	330(10)	913(20)	190(7)	0(0)	-161(15)	0(0)
P1	13100(21)	40663(42)	34924(20)	390(13)	1700(50)	303(12)	101(50)	-173(22)	-301(45)
CL1	0055(24)	16950(42)	19977(20)	697(17)	1907(49)	307(12)	327(55)	50(25)	-45(44)
O1	5113(49)	30207(87)	32119(44)	433(35)	1579(110)	426(30)	42(117)	-200(57)	-265(103)
C1A	10290(80)	27000(150)	37330(72)	469(56)	2159(214)	390(40)	470(201)	-192(91)	-360(106)
C2A	14930(73)	10546(150)	42105(60)	404(53)	2004(210)	357(44)	759(175)	-90(86)	-119(167)
C3A	14663(80)	21213(105)	49206(77)	475(56)	3171(296)	450(54)	707(231)	-209(97)	-136(226)
C4A	11045(83)	11001(244)	53751(85)	412(57)	5431(470)	353(50)	1239(274)	-137(105)	420(207)
C5A	9255(94)	1072(274)	50775(102)	322(60)	6057(506)	706(70)	350(333)	-170(126)	2001(323)
C6A	9491(107)	-925(199)	43757(116)	713(81)	2500(292)	837(106)	-02(275)	-403(160)	406(305)
C7A	12207(96)	7663(140)	39550(76)	711(81)	1651(102)	447(53)	562(224)	-107(117)	302(174)
C1B	10200(86)	40015(170)	20203(81)	453(67)	2000(240)	400(55)	-70(227)	95(105)	-420(201)
C2B	15503(85)	60057(141)	26240(75)	661(66)	1490(105)	511(50)	-311(200)	401(97)	-643(174)
C3B	9436(117)	61777(164)	21247(90)	1122(107)	1040(220)	530(66)	-643(273)	-450(149)	-06(207)
C4B	6720(144)	72922(104)	19660(103)	1434(160)	1009(230)	753(70)	-167(354)	-630(193)	505(243)
C5B	9943(145)	03163(170)	22504(90)	1509(160)	1636(195)	730(75)	-976(324)	604(101)	-336(214)
C6B	16034(109)	01714(107)	27650(80)	1070(99)	2001(220)	004(62)	-1730(250)	1003(120)	-1507(194)
C7B	10657(89)	70503(176)	29341(89)	660(60)	2449(255)	761(66)	-706(239)	940(110)	-1195(210)
C1C	13379(70)	50526(139)	42400(70)	342(40)	1647(107)	413(40)	296(167)	-204(84)	-307(161)
C2C	7044(77)	55704(150)	44100(73)	399(57)	1052(190)	393(49)	79(192)	-13(93)	-303(175)
C3C	7135(82)	63606(166)	49900(84)	457(59)	2610(234)	597(65)	-20(209)	201(107)	-947(201)
C4C	13679(95)	66105(165)	53059(80)	709(81)	2294(212)	459(55)	104(235)	22(114)	-1036(179)
C5C	19903(90)	61190(109)	52004(82)	671(60)	2043(251)	591(54)	010(232)	-512(105)	-1605(100)
C6C	20036(86)	53672(179)	46452(89)	446(63)	2051(251)	622(65)	012(224)	-346(109)	-1330(200)
H1A	23502	29305	39590	549200					
H2A	19193	22410	32740	549200					
H3A	16333	29464	51416	764300					
H4A	11395	13464	59045	759100					
H5A	6900	-5236	54097	850000					
H6A	7050	-9529	41570	003100					
H7A	12393	5005	34201	020700					
H1B	17904	42333	23927	714000					
H2B	23692	00335	30230	607700					
H3B	7100	54130	10712	607700					
H4B	1724	74154	10123	760900					
H5B	0512	91902	21441	014400					
H6B	10403	00914	30250	796000					
H7B	23904	70500	27610	730900					
H1C	2051	53007	41274	799900					
H2C	2316	07527	51351	526200					
H3C	13011	71695	50237	637100					
H4C	24050	63056	55163	746600					
H5C	25002	50533	44951	002500					

THE FORM OF THE ANISOTROPIC THERMAL PARAMETER IS:
 $\text{EXP}[-(B(1,1) \cdot h^2 + B(2,2) \cdot k^2 + B(3,3) \cdot l^2 + B(1,2) \cdot h \cdot k + B(1,3) \cdot h \cdot l + B(2,3) \cdot k \cdot l)]$.

TABELA XI - Análise da configuração em torno do ion
Co(II) no CoCl₂.2dbfpo

THE EQUATION OF THE PLANE IS OF THE FORM: $Ax + By + Cz = D = 0$
WHERE A,B,C & D ARE CONSTANTS AND X,Y & Z ARE ORTHOGONALIZED COORDINATES,

PLANE NO.	A	B	C	D	ATOM	X	Y	Z
-----	-	-	-	-	----	-	-	-
1	-0,4848	0,0000	-0,8751	-3,8714	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	-0,5843	2,9794	4,7838
					CL1	1,2841	1,8637	3,7581
					CL2	-2,2126	1,8637	5,6488
2	0,0429	0,0000	-0,5854	-2,8119	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	-0,5843	2,9794	4,7838
					O1	0,2881	4,1989	6,8423
					O2	-1,2886	4,1989	3,3638
3	0,8885	0,7131	-0,6965	-1,1915	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	-0,5843	2,9794	4,7838
					CL1	1,2841	1,8637	3,7581
					O1	0,2881	4,1989	6,8423
4	0,8885	-0,7131	-0,6965	-5,4486	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	-0,5843	2,9794	4,7838
					CL2	-2,2126	1,8637	5,6488
					O2	-1,2886	4,1989	3,3638
5	-0,6382	-0,7212	-0,2877	-3,1848	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	-0,5843	2,9794	4,7838
					CL1	1,2841	1,8637	3,7581
					O2	-1,2886	4,1989	3,3638
6	-0,6382	0,7212	-0,2877	1,1137	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	-0,5843	2,9794	4,7838
					CL2	-2,2126	1,8637	5,6488
					O1	0,2881	4,1989	6,8423

DIMEDRAL ANGLES BETWEEN PLANES:		
-----	-----	-----
PLANE NO.	PLANE NO.	DIMEDRAL ANGLE
-----	-----	-----
1	2	88,6
1	3	55,2
1	4	55,2
1	5	56,2
1	6	56,2
2	3	65,1
2	4	65,1
2	5	-66,5
2	6	-66,5
3	4	-89,0
3	5	-68,6
3	6	48,4
4	5	48,4
4	6	-68,6
5	6	-87,7

TABELA XII - Distâncias e ângulos intramoleculares
com seus respectivos desvios padrão
para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$

$\text{At}_1\text{-At}_2\text{-At}_3$	$d_{12} (\text{\AA})$	$d_{23} (\text{\AA})$	ângulo ($^\circ$)
$\text{Cl}_1\text{-Co-Cl}_2$	2,249(2)	2,249(2)	120,5(1)
$\text{O}_1\text{-Co-O}_2$	1,974(3)	1,974(3)	103,7(2)
$\text{O}_1\text{-Co-Cl}_1$	1,974(3)	2,249(2)	106,9(1)
$\text{O}_1\text{-Co-Cl}_2$	1,974(3)	2,249(2)	108,9(1)
$\text{Co-O}_1\text{-P}$	1,974(3)	1,529(4)	135,2(2)
$\text{O}_1\text{-P-C}_{1\text{A}}$	1,529(4)	1,797(7)	112,9(3)
$\text{O}_1\text{-P-C}_{1\text{B}}$	1,529(4)	1,825(8)	112,1(3)
$\text{O}_1\text{-P-C}_{1\text{C}}$	1,529(4)	1,780(6)	108,7(3)
$\text{C}_{1\text{A}}\text{-P-C}_{1\text{B}}$	1,797(7)	1,825(8)	105,1(3)
$\text{C}_{1\text{A}}\text{-P-C}_{1\text{C}}$	1,797(7)	1,780(6)	109,9(3)
$\text{C}_{1\text{B}}\text{-P-C}_{1\text{C}}$	1,825(8)	1,780(6)	108,0(3)
$\text{P-C}_{1\text{A}}\text{-C}_{2\text{A}}$	1,797(7)	1,482(9)	116,5(4)
$\text{C}_{1\text{A}}\text{-C}_{2\text{A}}\text{-C}_{3\text{A}}$	1,482(9)	1,381(8)	121,8(8)
$\text{C}_{1\text{A}}\text{-C}_{2\text{A}}\text{-C}_{7\text{A}}$	1,482(9)	1,363(9)	118,4(6)
$\text{C}_{3\text{A}}\text{-C}_{2\text{A}}\text{-C}_{7\text{A}}$	1,381(8)	1,363(9)	119,6(8)
$\text{C}_{2\text{A}}\text{-C}_{3\text{A}}\text{-C}_{4\text{A}}$	1,381(8)	1,462(14)	117,6(9)
$\text{C}_{3\text{A}}\text{-C}_{4\text{A}}\text{-C}_{5\text{A}}$	1,462(14)	1,330(18)	119,3(11)
$\text{C}_{4\text{A}}\text{-C}_{5\text{A}}\text{-C}_{6\text{A}}$	1,330(18)	1,359(14)	122,2(15)
$\text{C}_{5\text{A}}\text{-C}_{6\text{A}}\text{-C}_{7\text{A}}$	1,359(14)	1,367(11)	119,2(11)
$\text{C}_{6\text{A}}\text{-C}_{7\text{A}}\text{-C}_{2\text{A}}$	1,367(11)	1,363(9)	122,1(8)
$\text{P-C}_{1\text{B}}\text{-C}_{2\text{B}}$	1,826(8)	1,453(9)	113,5(5)
$\text{C}_{1\text{B}}\text{-C}_{2\text{B}}\text{-C}_{3\text{B}}$	1,453(9)	1,386(9)	122,2(8)
$\text{C}_{1\text{B}}\text{-C}_{2\text{B}}\text{-C}_{7\text{B}}$	1,453(9)	1,392(10)	122,0(8)
$\text{C}_{3\text{B}}\text{-C}_{2\text{B}}\text{-C}_{7\text{B}}$	1,386(9)	1,392(10)	115,8(8)
$\text{C}_{2\text{B}}\text{-C}_{3\text{B}}\text{-C}_{4\text{B}}$	1,386(9)	1,342(11)	121,5(8)
$\text{C}_{3\text{B}}\text{-C}_{4\text{B}}\text{-C}_{5\text{B}}$	1,342(11)	1,358(12)	122,3(10)
$\text{C}_{4\text{B}}\text{-C}_{5\text{B}}\text{-C}_{6\text{B}}$	1,358(12)	1,394(14)	117,4(11)
$\text{C}_{5\text{B}}\text{-C}_{6\text{B}}\text{-C}_{7\text{B}}$	1,394(14)	1,339(13)	120,3(10)
$\text{C}_{6\text{B}}\text{-C}_{7\text{B}}\text{-C}_{2\text{B}}$	1,339(13)	1,392(10)	122,7(10)
$\text{P}_1\text{-C}_{1\text{C}}\text{-C}_{2\text{C}}$	1,780(6)	1,360(7)	120,6(4)
$\text{P}_1\text{-C}_{1\text{C}}\text{-C}_{6\text{C}}$	1,780(6)	1,403(7)	121,8(5)
$\text{C}_{2\text{C}}\text{-C}_{1\text{C}}\text{-C}_{6\text{C}}$	1,360(7)	1,403(7)	117,5(6)
$\text{C}_{1\text{C}}\text{-C}_{2\text{C}}\text{-C}_{3\text{C}}$	1,360(7)	1,381(8)	121,2(6)
$\text{C}_{2\text{C}}\text{-C}_{3\text{C}}\text{-C}_{4\text{C}}$	1,381(8)	1,365(8)	119,8(6)
$\text{C}_{3\text{C}}\text{-C}_{4\text{C}}\text{-C}_{5\text{C}}$	1,365(8)	1,343(8)	119,5(6)
$\text{C}_{4\text{C}}\text{-C}_{5\text{C}}\text{-C}_{6\text{C}}$	1,343(8)	1,350(8)	121,7(6)
$\text{C}_{5\text{C}}\text{-C}_{6\text{C}}\text{-C}_{1\text{C}}$	1,350(8)	1,403(7)	120,2(6)

TABELA XIII - Equações dos planos dos radicais benzílicos e fenílico, coordenadas ortogonais absolutas, desvios padrão e distâncias dos átomos aos planos e ângulos diedros entre os planos no $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$

THE EQUATION OF THE PLANE IS OF THE FORM: $Ax + By + Cz = D = 0$

WHERE A, B, C & D ARE CONSTANTS AND X, Y & Z ARE ORTHOGONALIZED COORDINATES,

PLANE NO.	A	B	C	D	ATOM	X	Y	Z	DISTANCE	ESD
-----	-	-	-	-	----	-	-	-	-----	---
1	-0,8890	0,4079	-0,2080	-2,4952	-----ATOMS IN PLANE-----					
					C1A	2,5663	2,9681	7,0241	-0,037	0,015
					C2A	1,8588	2,0382	7,9358	0,023	0,014
					C3A	1,6671	2,3313	9,2718	0,036	0,016
					C4A	1,0656	1,2969	10,1118	-0,026	0,018
					C5A	0,6555	0,1618	9,5518	-0,008	0,020
					C6A	0,8399	-0,1018	8,2316	-0,005	0,020
					C7A	1,4321	0,8421	7,4402	0,018	0,017
					-----OTHER ATOMS-----					
					C1B	2,7472	5,2769	5,3206	1,099	0,016
					C1C	1,5727	5,5528	7,9776	1,703	0,013
					P1	1,6890	4,4688	6,5708	1,450	0,004
					O1	0,2801	4,1989	6,0423	2,702	0,009
2	0,6874	0,0530	-0,7243	-1,6702	-----ATOMS IN PLANE-----					
					C1B	2,7472	5,2769	5,3206	-0,015	0,015
					C2B	2,2842	6,6002	4,9377	0,014	0,015
					C3B	1,2840	6,7892	3,9971	0,018	0,019
					C4B	0,8229	8,0141	3,6999	-0,019	0,023
					C5B	1,3490	9,1396	4,2485	0,005	0,022
					C6B	2,3522	8,9804	5,2031	-0,006	0,018
					C7B	2,7943	7,7571	5,5197	0,004	0,017
					-----OTHER ATOMS-----					
					C1A	2,5663	2,9681	7,0241	-1,496	0,014
					C1C	1,5727	5,5528	7,9776	-2,733	0,013
					P1	1,6890	4,4688	6,5708	-1,691	0,004
					O1	0,2801	4,1989	6,0423	-2,291	0,009
3	0,1932	0,7760	-0,6004	-0,1626	-----ATOMS IN PLANE-----					
					C1C	1,5727	5,5528	7,9776	-0,015	0,014
					C2C	0,3873	6,1307	8,3112	0,005	0,015
					C3C	0,2885	6,9903	9,3872	0,006	0,017
					C4C	1,3963	7,2737	10,1321	-0,007	0,017
					C5C	2,5762	6,7256	9,7981	-0,004	0,017
					C6C	2,6994	5,8986	8,7386	0,014	0,019
					-----OTHER ATOMS-----					
					C1A	2,5663	2,9681	7,0241	-1,256	0,016
					C1B	2,7472	5,2769	5,3206	1,594	0,017
					P1	1,6890	4,4688	6,5708	0,012	0,004
					O1	0,2801	4,1989	6,0423	-0,153	0,009

DIMEDRAL ANGLES BETWEEN PLANES:

PLANE NO.	PLANE NO.	DIMEDRAL ANGLE
-----	-----	-----
1	2	-64,0
1	3	74,4
2	3	52,5

TABELA XIV - Fatores de estrutura observados e calculados
 finais para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$

BIS(DIBENZYLPHENYLPHOSPHINE OXIDE)DICHLORO COBALT (II)

PAGE 1

M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	
2	0-16		505	491	5	3-14	138	118	5	1-12	628	635	1	3-11	220	224	3	3-10	50	38
4	0-16		698	716	7	3-14	248	216	7	1-12	63	69	3	3-11	378	400	5	3-10	355	342
6	0-16		186	174	9	3-14	63	138	9	1-12	277	269	5	3-11	683	736	7	3-10	0	21
1	1-16		130	122	0	4-14	49	192	11	1-12	0	67	7	3-11	166	187	9	3-10	316	316
3	1-16		0	86	2	4-14	27	58	0	2-12	0	149	9	3-11	47	68	11	3-10	77	138
5	1-16		177	183	4	4-14	49	126	2	2-12	158	166	11	3-11	326	294	13	3-10	91	91
2	2-16		414	427	6	4-14	190	171	4	2-12	589	608	0	4-11	292	328	0	4-10	177	191
2	2-16		183	195	1	5-14	0	151	6	2-12	448	468	2	4-11	331	354	2	4-10	842	852
4	2-16		188	253	3	5-14	188	138	8	2-12	187	190	4	4-11	24	40	4	4-10	556	541
6	2-16		208	211	5	5-14	88	92	10	2-12	60	80	6	4-11	0	23	6	4-10	163	201
1	3-16		0	59	1	1-13	633	661	12	2-12	115	188	8	4-11	0	89	8	4-10	178	116
3	3-16		0	83	3	1-13	659	663	1	3-12	311	311	10	4-11	0	188	10	4-10	168	214
1	1-15		522	523	5	1-13	266	313	3	3-12	96	76	1	5-11	305	286	12	4-10	353	378
3	1-15		651	717	7	1-13	0	42	5	3-12	180	165	3	5-11	0	76	1	5-10	341	317
5	1-15		505	545	9	1-13	69	118	7	3-12	275	344	5	5-11	0	73	3	5-10	488	512
7	1-15		175	142	11	1-13	51	177	9	3-12	169	192	7	5-11	222	240	5	5-10	244	265
9	1-15		165	131	0	2-13	328	336	11	3-12	392	370	9	5-11	407	421	7	5-10	0	8
0	2-15		49	91	2	2-13	254	314	0	4-12	217	245	0	6-11	177	157	9	5-10	143	86
2	2-15		0	132	4	2-13	72	173	2	4-12	217	237	2	6-11	126	128	11	5-10	308	302
4	2-15		156	157	6	2-13	487	474	4	4-12	204	269	4	6-11	0	136	0	6-10	609	627
6	2-15		159	183	8	2-13	0	6	6	4-12	237	235	6	6-11	154	188	2	6-10	279	341
8	2-15		63	116	10	2-13	439	461	8	4-12	320	377	8	6-11	218	252	4	6-10	150	184
1	3-15		319	292	1	3-13	145	121	10	4-12	62	122	1	7-11	376	377	6	6-10	100	120
3	3-15		212	146	3	3-13	170	193	1	5-12	161	158	3	7-11	111	110	8	6-10	191	217
5	3-15		53	191	5	3-13	404	416	3	5-12	205	182	5	7-11	312	234	1	7-10	254	320
7	3-15		256	293	7	3-13	420	465	5	5-12	223	211	2	0-10	313	316	3	7-10	35	33
9	4-15		375	374	9	3-13	73	120	7	5-12	157	157	4	0-10	386	327	5	7-10	214	147
2	4-15		36	22	0	4-13	210	213	9	5-12	179	243	6	0-10	1196	1183	7	7-10	279	266
4	4-15		275	285	2	4-13	322	268	0	6-12	338	314	8	0-10	1074	1091	1	1-9	184	150
2	0-14		825	871	4	4-13	0	64	2	6-12	199	251	10	0-10	303	349	3	1-9	169	121
4	0-14		785	824	6	4-13	264	268	4	6-12	103	64	12	0-10	0	42	5	1-9	951	949
6	0-14		181	142	8	4-13	308	342	6	6-12	0	29	14	0-10	346	351	7	1-9	482	456
8	0-14		281	271	1	5-13	184	244	1	7-12	177	239	1	1-10	633	670	9	1-9	282	295
10	0-14		224	229	3	5-13	0	25	1	1-11	227	307	3	1-10	554	572	11	1-9	159	193
1	1-14		0	38	5	5-13	109	23	3	1-11	531	528	5	1-10	484	523	13	1-9	0	29
3	1-14		191	211	7	5-13	202	220	5	1-11	720	697	7	1-10	291	255	0	2-9	1407	1406
5	1-14		57	77	9	6-13	0	113	7	1-11	257	298	9	1-10	0	19	2	2-9	134	112
7	1-14		168	139	2	6-13	145	101	9	1-11	32	30	11	1-10	66	40	4	2-9	818	852
9	1-14		155	160	4	6-13	71	94	11	1-11	68	195	13	1-10	171	251	6	2-9	0	75
0	2-14		264	294	2	0-12	1390	1348	13	1-11	99	56	0	2-10	137	275	8	2-9	187	200
2	2-14		394	419	4	0-12	335	372	0	2-11	643	621	2	2-10	634	655	10	2-9	98	141
4	2-14		514	519	6	0-12	184	212	2	2-11	331	327	4	2-10	818	862	12	2-9	152	134
6	2-14		222	232	8	0-12	541	580	4	2-11	538	568	6	2-10	478	451	14	2-9	263	238
8	2-14		139	152	10	0-12	213	249	6	2-11	439	398	8	2-10	361	386	1	3-9	552	556
10	2-14		0	36	12	0-12	0	62	8	2-11	315	385	10	2-10	173	198	3	3-9	689	708
1	3-14		0	10	1	1-12	540	603	10	2-11	274	254	12	2-10	60	123	5	3-9	410	404
3	3-14		180	182	3	1-12	0	182	12	2-11	0	38	1	3-10	484	441	7	3-9	146	164

TABELA XIV - (continuação)

BIS(DIBENZYLPHENYLPHOSPHINE OXIDE)DICHLORO COBALT (II)

PAGE 2

M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC
9	3	-9	382	367	6	2	-8	650	627	15	1	-7	150	197	2	0	-6	1255	1350	2	6	+6	291	304
11	3	-9	303	298	8	2	-8	555	594	0	2	-7	405	404	4	0	-6	684	663	4	6	-6	838	864
13	3	-9	80	27	10	2	-8	235	223	2	2	-7	131	111	6	0	-6	2485	2228	6	6	-6	45	84
0	4	-9	659	652	12	2	-8	0	55	4	2	-7	1040	1046	8	0	-6	1443	1441	8	6	-6	315	276
2	4	-9	550	552	14	2	-8	35	144	6	2	-7	230	197	10	0	-6	79	85	10	6	-6	153	154
4	4	-9	50	14	1	3	-8	786	813	8	2	-7	746	743	12	0	-6	359	408	12	6	-6	207	278
6	4	-9	306	298	3	3	-8	0	83	10	2	-7	60	5	14	0	-6	59	68	1	7	-6	135	151
8	4	-9	2	66	5	3	-8	0	85	12	2	-7	545	523	1	1	-6	201	191	3	7	-6	323	344
10	4	-9	473	386	7	3	-8	281	310	14	2	-7	314	283	3	1	-6	561	582	5	7	-6	213	286
12	4	-9	224	181	9	3	-8	109	114	1	3	-7	937	927	5	1	-6	620	622	7	7	-6	34	60
1	5	-9	822	847	11	3	-8	331	307	3	3	-7	814	825	7	1	-6	108	82	9	7	-6	0	129
3	5	-9	424	844	13	3	-8	398	338	5	3	-7	464	460	9	1	-6	515	462	0	8	-6	79	67
5	5	-9	111	180	0	4	-8	416	398	7	3	-7	127	173	11	1	-6	267	311	2	8	-6	109	112
7	5	-9	193	234	2	4	-8	963	929	9	3	-7	477	467	13	1	-6	275	279	4	8	-6	129	131
9	5	-9	0	71	4	4	-8	641	694	11	3	-7	133	85	15	1	-6	145	169	6	8	-6	89	64
11	5	-9	80	110	6	4	-8	41	120	13	3	-7	0	48	0	2	-6	228	217	8	8	-6	0	125
0	6	-9	241	269	8	4	-8	69	77	0	4	-7	973	1017	2	2	-6	215	262	1	9	-6	87	13
2	6	-9	390	410	10	4	-8	257	265	2	4	-7	954	917	4	2	-6	364	359	3	9	-6	197	187
4	6	-9	226	249	12	4	-8	213	236	4	4	-7	166	161	6	2	-6	283	278	1	1	-5	1159	1218
6	6	-9	377	397	1	5	-8	682	746	6	4	-7	225	211	8	2	-6	867	847	3	1	-5	1406	1368
8	6	-9	0	68	3	5	-8	915	918	8	4	-7	157	159	10	2	-6	563	526	5	1	-5	1317	1249
10	6	-9	63	17	5	5	-8	136	44	10	4	-7	285	264	12	2	-6	101	137	7	1	-5	543	530
1	7	-9	281	310	7	5	-8	416	374	12	4	-7	0	27	14	2	-5	129	124	9	1	-5	1091	968
3	7	-9	76	71	9	5	-8	191	291	14	4	-7	180	89	1	3	-6	741	724	11	1	-5	445	455
5	7	-9	148	44	11	5	-8	431	395	1	5	-7	669	663	3	3	-6	1161	1149	13	1	-5	153	146
7	7	-9	0	23	0	6	-8	540	591	3	5	-7	286	228	5	3	-6	720	731	15	1	-5	0	12
9	8	-9	177	212	2	6	-8	90	73	5	5	-7	151	224	7	3	-6	334	332	0	2	-5	408	464
2	8	-9	76	84	4	6	-8	146	131	7	5	-7	78	69	9	3	-6	34	85	2	2	-5	741	772
4	8	-9	234	227	6	6	-8	392	413	9	5	-7	32	106	11	3	-6	296	282	4	2	-5	1249	1263
2	0	-8	221	273	8	6	-8	62	9	11	5	-7	286	279	13	3	-6	214	251	6	2	-5	214	239
4	0	-8	457	474	10	6	-8	0	64	13	5	-7	285	241	15	3	-6	63	28	8	2	-5	0	12
6	0	-8	1472	1407	1	7	-8	39	37	0	6	-7	708	718	0	4	-6	1014	1018	10	2	-5	322	367
8	0	-8	1127	1163	3	7	-8	22	16	2	6	-7	352	317	2	4	-6	1696	1519	12	2	-5	206	213
10	0	-8	97	78	5	7	-8	405	413	4	6	-7	137	209	4	4	-6	263	304	14	2	-5	142	36
12	0	-8	0	312	7	7	-8	409	432	6	6	-7	139	54	6	4	-6	157	132	1	3	-5	1495	1527
14	0	-8	223	243	9	7	-8	42	69	8	6	-7	0	81	8	4	-6	41	23	3	3	-5	111	100
1	1	-8	261	225	0	8	-8	187	206	10	6	-7	258	273	10	4	-6	275	232	5	3	-5	372	397
3	1	-8	485	510	2	8	-8	141	41	1	7	-7	128	137	12	4	-6	93	84	7	3	-5	646	710
5	1	-8	143	204	4	8	-8	0	51	3	7	-7	240	292	14	4	-6	107	127	9	3	-5	572	608
7	1	-8	392	357	6	8	-8	36	57	5	7	-7	203	255	1	5	-6	911	964	11	3	-5	205	155
9	1	-8	200	210	1	1	-7	704	728	7	7	-7	114	125	3	5	-6	321	257	13	3	-5	147	142
11	1	-8	0	54	3	1	-7	521	470	9	7	-7	101	27	5	5	-6	146	107	15	3	-5	421	439
13	1	-8	354	355	5	1	-7	1542	1523	0	8	-7	0	20	7	5	-6	0	65	0	4	-5	959	1001
15	1	-8	52	18	7	1	-7	432	411	2	8	-7	117	77	9	5	-6	195	178	2	4	-5	543	542
0	2	-8	685	697	9	1	-7	336	489	4	8	-7	304	344	11	5	-6	59	61	4	4	-5	207	178
2	2	-8	228	264	11	1	-7	339	383	6	8	-7	283	289	13	5	-6	0	10	6	4	-5	120	125
4	2	-8	265	217	13	1	-7	47	35	1	9	-7	188	214	0	4	-6	103	56	8	4	-5	190	182

TABELA XIV - (continuação)

BIS(DIBENZYLPHENYLPHOSPHINE OXIDE)DICHLORO COBALT (II)

PAGE 3

M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC
10	4	-5	270	240	2	2	-4	1076	997	8	8	-4	0	7	8	6	-3	244	259	11	3	-2	275	274
12	4	-5	67	14	4	2	-4	389	400	1	9	-4	150	164	10	6	-3	0	13	13	3	-2	0	59
14	4	-5	454	483	6	2	-4	705	665	3	9	-4	71	88	12	6	-3	199	198	15	3	-2	190	177
1	5	-5	579	607	8	2	-4	1082	1069	5	9	-4	133	198	1	7	-3	289	301	0	4	-2	156	139
3	5	-5	998	1064	10	2	-4	209	131	1	1	-3	536	519	3	7	-3	637	744	2	4	-2	295	347
5	5	-5	386	410	12	2	-4	70	139	3	1	-3	2905	2797	5	7	-3	230	279	4	4	-2	726	763
7	5	-5	111	118	14	2	-4	232	222	5	1	-3	774	715	7	7	-3	136	142	6	4	-2	729	750
9	5	-5	138	47	1	3	-4	1093	1087	7	1	-3	191	113	9	7	-3	146	110	8	4	-2	0	69
11	5	-5	82	77	3	3	-4	1505	1572	9	1	-3	975	1027	11	7	-3	0	42	10	4	-2	0	100
13	5	-5	62	126	5	3	-4	235	310	11	1	-3	660	660	0	8	-3	92	87	12	4	-2	331	411
0	6	-5	371	386	7	3	-4	45	52	13	1	-3	130	110	2	8	-3	386	432	14	4	-2	293	252
2	6	-5	507	509	9	3	-4	0	46	15	1	-3	49	14	4	8	-3	189	214	1	5	-2	146	229
4	6	-5	66	83	11	3	-4	0	7	0	2	-3	424	483	6	8	-3	77	52	3	5	-2	81	141
6	6	-5	81	144	13	3	-4	0	101	2	2	-3	2061	3033	8	8	-3	274	264	5	5	-2	787	906
8	6	-5	263	295	15	3	-4	158	185	4	2	-3	1387	1488	1	9	-3	175	176	7	5	-2	138	55
10	6	-5	19	61	0	4	-4	323	349	6	2	-3	173	256	3	9	-3	0	64	9	5	-2	308	269
12	6	-5	0	52	2	4	-4	117	69	8	2	-3	236	261	5	9	-3	217	202	11	5	-2	388	382
1	7	-5	102	156	4	4	-4	317	309	10	2	-3	0	16	2	0	-2	3472	3362	13	5	-2	325	366
3	7	-5	563	700	6	4	-4	636	659	12	2	-3	200	188	4	0	-2	644	680	0	6	-2	345	343
5	7	-5	416	417	8	4	-4	227	226	14	2	-3	173	97	6	0	-2	607	491	2	6	-2	755	780
7	7	-5	181	181	10	4	-4	138	143	1	3	-3	654	722	8	0	-2	968	909	4	6	-2	293	374
9	7	-5	78	56	12	4	-4	218	232	3	3	-3	192	226	10	0	-2	863	870	6	6	-2	245	290
0	8	-5	125	78	14	4	-4	346	348	5	3	-3	395	417	12	0	-2	274	267	8	6	-2	322	367
2	8	-5	53	186	1	5	-4	150	166	7	3	-3	940	986	14	0	-2	441	466	10	6	-2	0	11
4	8	-5	472	512	3	5	-4	419	405	9	3	-3	454	398	16	0	-2	233	277	12	6	-2	0	62
6	8	-5	0	94	5	5	-4	363	371	11	3	-3	101	102	1	1	-2	1517	1570	1	7	-2	427	514
8	8	-5	30	41	7	5	-4	247	215	13	3	-3	555	588	3	1	-2	410	399	3	7	-2	0	18
1	9	-5	232	234	9	5	-4	223	160	15	3	-3	237	216	5	1	-2	265	256	5	7	-2	62	69
3	9	-5	36	20	11	5	-4	0	19	0	4	-3	123	161	7	1	-2	655	626	7	7	-2	272	288
5	9	-5	204	49	13	5	-4	255	295	2	4	-3	325	382	9	1	-2	278	261	9	7	-2	210	220
2	0	-4	135	72	0	6	-4	342	341	4	4	-3	513	527	11	1	-2	114	1	11	7	-2	145	111
4	0	-4	1680	1619	2	6	-4	832	853	6	4	-3	506	571	13	1	-2	403	406	0	8	-2	0	84
6	0	-4	592	490	4	6	-4	812	867	8	4	-3	383	342	15	1	-2	135	196	2	8	-2	221	243
8	0	-4	755	752	6	6	-4	0	18	10	4	-3	309	293	0	2	-2	2176	2283	4	8	-2	299	309
10	0	-4	1192	1190	8	6	-4	87	77	12	4	-3	178	137	2	2	-2	150	68	6	8	-2	59	174
12	0	-4	885	846	10	6	-4	72	164	14	4	-3	358	366	4	2	-2	440	477	8	8	-2	74	29
14	0	-4	205	227	12	6	-4	0	171	1	5	-3	765	762	6	2	-2	192	193	1	9	-2	577	544
16	0	-4	248	216	1	7	-4	268	289	3	5	-3	412	474	8	2	-2	390	408	3	9	-2	157	112
1	1	-4	623	641	3	7	-4	159	206	5	5	-3	240	372	10	2	-2	657	672	5	9	-2	143	112
3	1	-4	452	452	5	7	-4	192	169	7	5	-3	259	294	12	2	-2	532	550	1	1	-1	1627	1887
5	1	-4	667	412	7	7	-4	196	165	9	5	-3	75	63	14	2	-2	223	259	3	1	-1	1224	1104
7	1	-4	314	310	9	7	-4	391	386	11	5	-3	116	112	16	2	-2	0	12	5	1	-1	750	837
9	1	-4	232	207	11	7	-4	279	232	13	5	-3	191	233	1	3	-2	459	558	7	1	-1	602	577
11	1	-4	258	242	0	8	-4	78	122	0	6	-3	691	700	3	3	-2	921	1034	9	1	-1	1291	1275
13	1	-4	32	59	2	8	-4	235	211	2	6	-3	128	91	5	3	-2	1438	1477	11	1	-1	352	321
15	1	-4	0	32	4	8	-4	329	303	4	6	-3	173	145	7	3	-2	465	461	13	1	-1	131	153
0	2	-4	1838	1850	6	8	-4	60	147	6	6	-3	295	326	9	3	-2	359	361	15	1	-1	160	194

TABELA XIV - (continuação)

BIS(DIBENZYLPHENYLPHOSPHINE OXIDE)DICHLORO COBALT (II)

PAGE 4

H	K	L	FORS	FCALC	H	K	L	FORS	FCALC	H	K	L	FORS	FCALC	H	K	L	FORS	FCALC	H	K	L	FORS	FCALC
0	2	-1	211	199	4	0	-1	0	116	3	5	0	651	604	9	3	1	910	934	14	0	2	510	503
2	2	-1	933	953	6	0	-1	0	52	5	5	0	968	1012	11	3	1	1000	1046	1	1	2	553	562
4	2	-1	685	699	8	0	-1	316	261	7	5	0	188	135	13	3	1	304	302	3	1	2	1004	939
6	2	-1	859	814	1	9	-1	143	96	9	5	0	222	254	15	3	1	224	181	5	1	2	340	273
8	2	-1	497	511	3	9	-1	0	61	11	5	0	314	323	0	4	1	268	366	7	1	2	527	519
10	2	-1	310	344	5	9	-1	278	299	13	5	0	0	50	2	4	1	276	271	9	1	2	151	160
12	2	-1	397	401	2	0	0	1119	921	0	6	0	0	155	4	4	1	301	312	11	1	2	33	30
14	2	-1	99	66	4	0	0	4009	4052	2	6	0	195	187	6	4	1	99	164	13	1	2	294	269
16	2	-1	215	198	6	0	0	153	95	4	6	0	353	362	8	4	1	720	729	15	1	2	0	66
1	3	-1	459	467	8	0	0	371	347	6	6	0	626	641	10	4	1	289	314	0	2	2	2136	2243
3	3	-1	323	264	10	0	0	457	495	8	6	0	256	307	12	4	1	121	117	2	2	2	2459	2593
5	3	-1	1014	1042	12	0	0	230	263	10	6	0	45	17	14	4	1	71	22	4	2	2	1430	1404
7	3	-1	894	868	14	0	0	573	556	12	6	0	62	76	1	5	1	124	135	6	2	2	1046	1036
9	3	-1	124	109	16	0	0	408	415	1	7	0	320	435	3	5	1	188	115	8	2	2	64	63
11	3	-1	444	419	1	1	0	941	1008	3	7	0	163	245	5	5	1	774	775	10	2	2	1233	1208
13	3	-1	408	526	3	1	0	1029	982	5	7	0	136	163	7	5	1	762	798	12	2	2	335	334
15	3	-1	51	129	5	1	0	1670	1639	7	7	0	135	129	9	5	1	330	350	14	2	2	0	70
0	4	-1	278	366	7	1	0	198	238	9	7	0	210	203	11	5	1	173	146	1	3	2	528	568
2	4	-1	0	34	9	1	0	496	550	11	7	0	260	223	13	5	1	55	17	3	3	2	179	213
4	4	-1	828	812	11	1	0	594	594	0	8	0	0	105	0	6	1	0	18	5	3	2	409	408
6	4	-1	1010	1042	13	1	0	157	123	2	8	0	181	189	2	6	1	268	209	7	3	2	1059	1068
8	4	-1	170	192	15	1	0	509	539	4	8	0	222	262	4	6	1	297	349	9	3	2	383	398
10	4	-1	204	218	0	2	0	754	773	6	8	0	153	117	6	8	1	340	333	11	3	2	474	510
12	4	-1	302	359	2	2	0	656	676	8	8	0	71	50	8	6	1	292	353	13	3	2	79	160
14	4	-1	76	105	4	2	0	908	923	1	9	0	593	567	10	6	1	300	317	15	3	2	276	339
1	5	-1	273	322	6	2	0	1157	1091	3	9	0	0	34	12	6	1	203	186	0	4	2	126	139
3	5	-1	158	93	8	2	0	229	233	5	9	0	0	18	1	7	1	51	33	2	4	2	0	36
5	5	-1	407	522	10	2	0	257	250	1	1	1	854	793	3	7	1	152	115	4	4	2	1409	1425
7	5	-1	574	637	12	2	0	585	631	3	1	1	591	460	5	7	1	319	344	6	4	2	628	612
9	5	-1	283	319	14	2	0	180	181	5	1	1	1314	1192	7	7	1	423	391	8	4	2	544	573
11	5	-1	89	107	1	3	0	115	104	7	1	1	605	585	9	7	1	69	69	10	4	2	715	715
13	5	-1	187	151	3	3	0	1042	1073	9	1	1	0	35	11	7	1	175	145	12	4	2	167	62
0	6	-1	0	10	5	3	0	507	544	11	1	1	314	256	0	8	1	401	401	14	4	2	99	67
2	6	-1	103	90	7	3	0	118	60	13	1	1	404	403	2	8	1	72	203	1	5	2	50	92
4	6	-1	246	311	9	3	0	189	140	15	1	1	339	396	4	8	1	74	159	3	5	2	682	895
6	6	-1	452	471	11	3	0	0	4	0	2	1	195	190	6	8	1	164	157	5	5	2	570	546
8	6	-1	0	80	13	3	0	0	56	2	2	1	975	1004	8	8	1	182	174	7	5	2	0	50
10	6	-1	160	197	15	3	0	0	47	4	2	1	112	118	1	9	1	139	103	9	5	2	476	489
12	6	-1	373	374	0	4	0	253	318	6	2	1	702	719	3	9	1	256	174	11	5	2	212	236
1	7	-1	315	427	2	4	0	54	106	8	2	1	394	367	5	9	1	36	120	13	5	2	93	44
3	7	-1	374	435	4	4	0	1112	1188	10	2	1	348	320	0	0	2	1420	1347	0	6	2	321	343
5	7	-1	278	293	6	4	0	856	964	12	2	1	459	473	2	0	2	768	844	2	6	2	280	300
7	7	-1	247	285	8	4	0	88	81	14	2	1	117	58	4	0	2	2379	2213	4	6	2	28	125
9	7	-1	60	129	10	4	0	514	545	1	3	1	110	199	6	0	2	950	882	6	6	2	755	778
11	7	-1	166	79	12	4	0	514	517	3	3	1	1238	1259	8	0	2	759	797	8	6	2	467	473
0	8	-1	400	401	14	4	0	71	25	5	3	1	314	254	10	0	2	0	32	10	6	2	114	97
2	8	-1	373	459	1	5	0	534	615	7	3	1	333	356	12	0	2	883	915	12	6	2	62	15

TABELA XIV - (continuação)

BIS(DIBENZYLPHENYLPHOSPHINE OXIDE)DICHLORO COBALT (II)

PAGE 5

H	K	L	FOBS	FCALC	H	K	L	FOBS	FCALC	H	K	L	FOBS	FCALC	H	K	L	FOBS	FCALC	H	K	L	FOBS	FCALC
1	7	2	397	486	5	5	3	491	538	12	2	4	113	126	11	1	5	511	511	0	0	6	0	58
3	7	2	165	212	7	5	3	514	532	14	2	4	526	564	13	1	5	630	643	2	0	6	1924	1789
5	7	2	255	241	9	5	3	418	422	1	3	4	851	856	0	2	5	394	464	4	0	6	1789	1671
7	7	2	305	321	11	5	3	0	91	3	3	4	291	301	2	2	5	819	754	6	0	6	36	103
9	7	2	65	174	13	5	3	176	184	5	3	4	138	138	4	2	5	419	412	8	0	6	200	155
11	7	2	36	78	0	6	3	649	700	7	3	4	276	289	6	2	5	172	196	10	0	6	736	679
0	8	2	0	84	2	6	3	417	424	9	3	4	169	144	8	2	5	220	191	12	0	6	715	712
2	8	2	146	177	4	6	3	272	253	11	3	4	205	211	10	2	5	612	650	14	0	6	166	155
4	8	2	87	130	6	6	3	325	358	13	3	4	345	390	12	2	5	354	336	1	1	6	895	868
6	8	2	154	154	8	6	3	237	277	0	4	4	297	349	14	2	5	264	240	3	1	6	137	112
8	8	2	159	82	10	6	3	178	231	2	4	4	1061	1027	1	3	5	1822	1816	5	1	6	241	262
1	9	2	488	446	12	6	3	0	100	4	4	4	558	528	3	3	5	274	259	7	1	6	0	83
3	9	2	0	164	1	7	3	345	346	6	4	4	400	414	5	3	5	86	34	9	1	6	473	449
5	9	2	108	149	3	7	3	103	83	8	4	4	814	866	7	3	5	931	956	11	1	6	377	434
1	1	3	311	425	5	7	3	235	300	10	4	4	545	531	9	3	5	354	421	13	1	6	0	92
3	1	3	2118	1919	7	7	3	388	373	12	4	4	155	96	11	3	5	190	155	0	2	6	167	217
5	1	3	141	175	9	7	3	0	79	1	5	4	105	196	13	3	5	341	364	2	2	6	1398	1198
7	1	3	420	425	0	8	3	0	87	3	5	4	387	352	0	4	5	961	1002	4	2	6	1027	977
9	1	3	544	527	2	8	3	216	259	5	5	4	253	275	2	4	5	216	264	6	2	6	976	908
11	1	3	529	516	4	8	3	292	342	7	5	4	685	613	4	4	5	485	475	8	2	6	235	247
13	1	3	676	650	6	8	3	187	210	9	5	4	666	669	6	4	5	356	351	10	2	6	114	58
15	1	3	389	354	8	8	3	0	54	11	5	4	0	27	8	4	5	651	654	12	2	6	338	385
0	2	3	421	443	1	9	3	172	131	13	5	4	366	273	10	4	5	222	214	14	2	6	256	233
2	2	3	2574	2545	3	9	3	0	41	0	6	4	327	341	12	4	5	101	103	1	3	6	122	66
4	2	3	194	163	5	9	3	36	7	2	6	4	332	311	1	5	5	86	47	3	3	6	202	166
6	2	3	736	735	0	0	4	3118	3122	4	6	4	477	472	3	5	5	271	210	5	3	6	228	240
8	2	3	140	97	2	0	4	1762	1547	6	6	4	598	575	5	5	5	166	213	7	3	6	497	468
10	2	3	240	271	4	0	4	2291	2240	8	6	4	194	173	7	5	5	426	433	9	3	6	605	577
12	2	3	294	269	6	0	4	81	72	10	6	4	49	117	9	5	5	361	372	11	3	6	394	365
14	2	3	389	379	8	0	4	1211	1253	1	7	4	207	240	11	5	5	338	319	13	3	6	0	49
1	3	3	1606	1674	10	0	4	373	349	3	7	4	493	491	0	6	5	433	386	0	4	6	1017	1018
3	3	3	1294	1277	12	0	4	879	870	5	7	4	464	529	2	6	5	367	391	2	4	6	154	198
5	3	3	53	134	14	0	4	616	684	7	7	4	244	228	4	6	5	145	161	4	4	6	337	340
7	3	3	913	873	1	1	4	783	936	9	7	4	0	25	6	6	5	295	307	6	4	6	687	673
9	3	3	1085	992	3	1	4	730	709	0	8	4	175	122	8	6	5	348	347	8	4	6	625	619
11	3	3	115	139	5	1	4	1221	1168	2	8	4	0	23	10	6	5	81	135	10	4	6	0	45
13	3	3	181	182	7	1	4	363	327	4	8	4	50	10	1	7	5	188	129	12	4	6	0	60
0	4	3	87	162	9	1	4	300	294	6	8	4	38	20	3	7	5	0	57	1	5	6	478	372
2	4	3	124	35	11	1	4	369	355	8	8	4	112	150	5	7	5	189	134	3	5	6	102	43
4	4	3	232	289	13	1	4	189	22	1	9	4	277	263	7	7	5	0	14	5	5	6	0	71
6	4	3	729	765	15	1	4	72	5	3	9	4	330	303	9	7	5	247	216	7	5	6	571	601
8	4	3	556	599	0	2	4	1021	1050	5	9	4	142	156	0	8	5	107	78	9	5	6	396	397
10	4	3	129	154	2	2	4	1382	1180	1	1	5	912	812	2	8	5	304	346	11	5	6	210	244
12	4	3	0	91	4	2	4	501	418	3	1	5	1391	1247	4	8	5	427	448	0	6	6	148	56
14	4	3	0	108	6	2	4	569	521	5	1	5	838	711	6	8	5	86	97	2	6	6	372	379
1	5	3	157	155	8	2	4	1079	1083	7	1	5	527	498	1	9	5	67	25	4	6	6	178	197
3	5	3	126	85	10	2	4	0	73	9	1	5	57	24	3	9	5	0	80	6	6	6	125	41

TABELA XIV - (continuação)

BIS(DIBENZYLPHENYLPHOSPHINE OXIDE)DICHLORO COBALT (II)

PAGE 6

M	K	L	F088	FCALC	M	K	L	F088	FCALC	M	K	L	F088	FCALC	M	K	L	F088	FCALC	M	K	L	F088	FCALC
8	6	6	0	106	2	6	7	252	242	3	5	8	60	77	2	6	9	235	235	4	6	10	73	26
10	6	6	538	502	4	6	7	237	279	5	5	8	434	428	4	6	9	252	258	6	6	10	195	250
1	7	6	301	301	6	6	7	406	417	7	5	8	280	291	6	6	9	49	16	1	7	10	219	259
3	7	6	392	424	8	6	7	0	36	9	5	8	113	114	8	6	9	51	39	3	7	10	87	44
5	7	6	284	337	10	6	7	0	22	0	6	8	569	591	1	7	9	498	455	5	7	10	176	180
7	7	6	0	68	1	7	7	196	222	2	6	8	353	343	3	7	9	0	30	1	1	11	429	379
9	7	6	0	88	3	7	7	0	43	4	6	8	340	295	5	7	9	0	9	3	1	11	356	301
0	8	6	0	67	5	7	7	312	240	6	6	8	46	47	0	8	9	225	212	5	1	11	469	478
2	8	6	98	39	7	7	7	246	257	8	6	8	622	588	2	8	9	275	266	7	1	11	884	899
4	8	6	0	56	0	8	7	60	20	1	7	8	295	293	0	8	10	96	56	9	1	11	458	500
6	8	6	256	204	2	8	7	467	455	3	7	8	321	339	2	0	10	736	694	11	1	11	172	146
1	9	6	281	279	4	8	7	297	271	5	7	8	160	150	4	0	10	1105	1052	0	2	11	659	621
1	1	7	1051	946	6	8	7	164	116	7	7	8	274	241	6	0	10	730	789	2	2	11	368	369
3	1	7	1071	931	0	0	8	132	214	0	8	8	257	206	8	0	10	886	875	4	2	11	30	44
5	1	7	410	379	2	0	8	171	166	2	8	8	0	91	10	0	10	230	287	6	2	11	55	109
7	1	7	489	458	4	0	8	1679	1615	4	8	8	0	78	12	0	10	322	329	8	2	11	201	218
9	1	7	545	553	6	0	8	1277	1249	1	1	9	543	492	1	1	10	578	563	10	2	11	0	61
11	1	7	487	474	8	0	8	421	418	3	1	9	576	514	3	1	10	227	255	1	3	11	312	317
13	1	7	166	191	10	0	8	475	432	5	1	9	1028	1020	5	1	10	196	211	3	3	11	609	667
0	2	7	425	424	12	0	8	66	94	7	1	9	689	698	7	1	10	336	352	5	3	11	366	354
2	2	7	318	312	1	1	8	178	228	9	1	9	447	440	9	1	10	367	379	7	3	11	178	193
4	2	7	0	123	3	1	8	365	355	11	1	9	186	202	11	1	10	192	196	9	3	11	219	275
6	2	7	674	703	5	1	8	27	183	0	2	9	1435	1404	0	2	10	227	275	0	4	11	361	328
8	2	7	339	322	7	1	8	164	208	2	2	9	396	432	2	2	10	183	195	2	4	11	423	407
10	2	7	884	885	9	1	8	512	507	4	2	9	691	701	4	2	10	665	642	4	4	11	478	484
12	2	7	180	210	11	1	8	377	390	6	2	9	172	159	6	2	10	626	666	6	4	11	390	419
1	3	7	815	753	13	1	8	185	205	8	2	9	765	721	8	2	10	412	452	8	4	11	213	248
3	3	7	45	73	0	2	8	766	697	10	2	9	475	495	10	2	10	286	342	1	5	11	484	491
5	3	7	943	927	2	2	8	543	502	12	2	9	195	186	1	3	10	573	544	3	5	11	341	293
7	3	7	726	724	4	2	8	1041	969	1	3	9	331	312	3	3	10	89	74	5	5	11	182	228
9	3	7	401	351	6	2	8	714	708	3	3	9	520	501	5	3	10	0	47	7	5	11	0	99
11	3	7	0	135	8	2	8	156	192	5	3	9	817	816	7	3	10	398	413	0	6	11	193	157
13	3	7	505	522	10	2	8	140	74	7	3	9	44	43	9	3	10	0	34	2	6	11	154	163
0	4	7	1018	1017	12	2	8	276	340	9	3	9	204	162	11	3	10	161	183	4	6	11	290	291
2	4	7	191	230	1	3	8	671	639	11	3	9	456	455	0	4	10	187	191	6	6	11	0	151
4	4	7	552	513	3	3	8	194	145	0	4	9	677	682	2	4	10	312	317	1	7	11	291	274
6	4	7	376	323	5	3	8	395	411	2	4	9	0	14	4	4	10	651	633	3	7	11	36	137
8	4	7	361	351	7	3	8	222	212	4	4	9	286	232	6	4	10	338	336	0	8	12	195	122
10	4	7	180	183	9	3	8	596	577	6	4	9	361	394	8	4	10	0	20	2	8	12	291	304
12	4	7	324	292	11	3	8	194	206	8	4	9	246	201	10	4	10	477	508	4	8	12	458	421
1	5	7	989	1033	0	4	8	390	398	10	4	9	0	94	1	5	10	89	21	6	8	12	1050	1096
3	5	7	290	252	2	4	8	166	140	1	5	9	486	475	3	5	10	479	448	8	8	12	706	755
5	5	7	83	23	4	4	8	312	313	3	5	9	132	125	5	5	10	33	29	10	8	12	184	226
7	5	7	189	121	6	4	8	486	465	5	5	9	159	133	7	5	10	263	253	1	1	12	30	6
9	5	7	289	287	8	4	8	0	81	7	5	9	0	89	9	5	10	276	299	3	1	12	0	45
11	5	7	217	278	10	4	8	222	234	9	5	9	319	294	8	6	10	715	627	5	1	12	286	191
0	6	7	745	718	1	5	8	0	33	8	6	9	91	269	2	6	10	174	152	7	1	12	194	213

TABELA XIV - (continuação)

BIS(DIBENZYLPHENYLPHOSPHINE OXIDE)DICHLORO COBALT (II)

M	K	L	F OBS	F CALC	M	K	L	F OBS	F CALC
0	1	12	230	201	4	0	14	621	594
0	2	12	0	149	6	0	14	676	732
2	2	12	431	430	1	1	14	112	108
4	2	12	530	562	3	1	14	266	275
6	2	12	372	354	5	1	14	424	480
8	2	12	274	307	7	1	14	188	174
1	3	12	428	461	0	2	14	268	294
3	3	12	502	488	2	2	14	294	249
5	3	12	114	115	4	2	14	77	59
7	3	12	247	266	6	2	14	251	238
9	3	12	0	87	1	3	14	499	511
2	4	12	192	245	3	3	14	223	239
4	4	12	508	528	5	3	14	62	28
6	4	12	23	81	0	4	14	232	192
8	4	12	0	24	2	4	14	437	457
0	4	12	377	427	4	4	14	259	286
1	5	12	362	379	1	5	14	498	477
3	5	12	435	440	1	1	15	226	224
5	5	12	167	138	3	1	15	251	234
7	6	12	356	314	5	1	15	0	147
9	6	12	218	237	0	2	15	49	91
0	6	12	196	161	2	2	15	413	470
1	1	13	145	144	4	2	15	281	293
3	1	13	160	163	1	3	15	392	409
5	1	13	710	727	3	3	15	85	197
7	1	13	440	490	0	4	15	410	378
9	1	13	63	104	2	4	15	220	183
0	2	13	330	336	0	0	16	212	186
2	2	13	244	259	2	0	16	359	405
4	2	13	452	486	1	1	16	0	77
6	2	13	77	126	3	1	16	385	392
8	2	13	208	206	0	2	16	403	427
1	3	13	374	363	2	2	16	0	122
3	3	13	174	187	1	3	16	125	123
5	3	13	149	145					
7	3	13	433	457					
9	4	13	178	213					
2	4	13	655	629					
4	4	13	207	138					
6	4	13	122	82					
1	5	13	432	345					
3	5	13	396	369					
5	5	13	52	85					
0	6	13	36	113					
2	6	13	255	249					
0	0	14	36	78					
2	0	14	121	129					

TABELA XV - Distribuição estatística dos fatores de estrutura normalizados para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$

STATISTICAL DISTRIBUTION OF E'S CALCULATED FROM WILSON PLOTS

QUANTITY	CALCULATED	THEORETICAL (CENTRIC)	THEORETICAL (ACENTRIC)
AVERAGE MAG OF E'S	0.902	0.798	0.886
AVERAGE OF (E)**2	1.992	1.000	1.000
AVERAGE OF ABS(E**2-1)	0.677	0.968	0.736
PERCENTAGE GREATER THAN ONE	34.68	32.00	37.00
PERCENTAGE GREATER THAN TWO	1.82	5.00	1.00
PERCENTAGE GREATER THAN THREE	0.03	0.30	0.01

STATISTICAL DISTRIBUTION OF E'S AFTER RESCALING AVG E**2 TO 1.0

TEMPERATURE FACTOR USED WAS 3.501

SCALE FACTOR USED WAS 1.542

QUANTITY	CALCULATED	THEORETICAL (CENTRIC)	THEORETICAL (ACENTRIC)
AVERAGE MAG OF E'S	0.921	0.798	0.886
AVERAGE OF (E)**2	1.000	1.000	1.000
AVERAGE OF ABS(E**2-1)	0.686	0.968	0.736
PERCENTAGE GREATER THAN ONE	37.72	32.00	37.00
PERCENTAGE GREATER THAN TWO	1.13	5.00	1.00
PERCENTAGE GREATER THAN THREE	0.03	0.30	0.01

TABELA XVI - Figuras de mérito para os conjuntos de fases calculados pelo MULTAN para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$

SUMMARY OF FIGURES OF MERIT OUTPUT BY TANGENT FORMULA

	ABS FOM	PSI ZERO	RESID
MAXIMUM VALUE	1.5826	0.0000E 00	45.08
MINIMUM VALUE	0.8407	0.0000E 00	18.59
RELATIVE WEIGHTS (FOR COMBINED FOM)	1.00	1.00	1.00

NUMSET	ABS FOM	PSI ZERO	RESID	COMBINED FOM
1	1.0533	0.0000E 00	38.62	1.5305
2	0.8820	0.0000E 00	43.72	1.1873
3	0.9512	0.0000E 00	42.75	1.2371
4	1.3369	0.0000E 00	31.57	2.1789
5	1.5826	0.0000E 00	18.59	3.0000
6	0.9369	0.0000E 00	40.95	1.2856
7	0.8407	0.0000E 00	45.08	1.0000
8	0.8981	0.0000E 00	41.97	1.1842

TABELA XVII - Parâmetros posicionais e de vibração térmica e seus respectivos desvios padrão ($\times 10^5$) do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{dbfpo}$

ATOMS	X	Y	Z	U(1,1)	U(2,2)	U(3,3)	U(1,2)	U(1,3)	U(2,3)
-----	-	-	-	-----	-----	-----	-----	-----	-----
CO	24377(16)	25699(18)	27128(8)	708(16)	178(5)	156(3)	-94(21)	138(12)	22(9)
P1	-4925(29)	22791(17)	18261(14)	693(27)	244(9)	188(6)	-12(34)	200(21)	-19(15)
P2	32425(33)	44244(18)	20372(15)	1185(36)	220(10)	195(7)	-224(39)	273(25)	-25(15)
CL1	35706(34)	15725(18)	19361(16)	1277(37)	273(18)	312(8)	304(40)	248(30)	8(17)
CL2	25154(34)	27396(23)	32525(14)	1487(40)	408(17)	202(6)	-422(49)	431(25)	-112(19)
O1	3982(72)	24439(36)	16833(34)	735(78)	383(29)	217(17)	-190(99)	117(68)	-138(44)
O2	29082(74)	35576(40)	18720(35)	1018(91)	140(24)	233(19)	-217(84)	138(70)	44(37)
C1A	-685(123)	24866(71)	3644(48)	727(107)	339(43)	173(23)	-374(146)	179(81)	-93(64)
C2A	-6853(148)	32424(82)	1274(66)	1282(181)	381(53)	295(36)	-29(198)	28(143)	145(77)
C3A	-2716(152)	36218(94)	-3639(69)	1550(204)	686(72)	289(38)	-969(213)	-79(156)	111(93)
C4A	6825(148)	32296(93)	-5894(66)	1446(186)	676(74)	237(33)	-941(207)	-187(141)	251(86)
C5A	12399(125)	25114(106)	-3458(61)	919(137)	933(98)	244(30)	-928(214)	232(124)	-149(109)
C6A	2722(113)	21143(86)	1457(55)	785(115)	608(63)	218(28)	-439(166)	241(98)	-114(76)
C1B	-22945(181)	23814(61)	8870(52)	657(183)	288(39)	263(26)	-52(177)	344(81)	41(57)
C2B	-26146(117)	26743(88)	13842(57)	1029(122)	438(53)	308(29)	-11(188)	563(98)	-135(76)
C3B	-42296(135)	27678(89)	13126(65)	1428(155)	512(68)	378(35)	-196(194)	788(111)	-144(85)
C4B	-50954(126)	26496(66)	6971(66)	999(135)	445(62)	438(39)	-29(177)	552(113)	189(89)
C5B	-47549(119)	23382(89)	1694(65)	833(134)	231(62)	390(39)	-116(141)	178(120)	63(72)
C6B	-33769(116)	21788(68)	2528(59)	865(130)	284(43)	288(31)	-292(143)	213(106)	-41(65)
C1C	-2212(118)	12148(65)	18715(58)	937(147)	187(36)	253(32)	-158(144)	-14(118)	-13(63)
C2C	-13624(116)	4812(63)	5888(56)	943(124)	195(37)	254(29)	79(137)	386(96)	-17(68)
C3C	-15731(127)	4575(89)	-692(57)	1292(153)	238(42)	251(30)	308(153)	338(112)	40(63)
C4C	-26467(142)	-212(73)	-5245(63)	1424(188)	269(44)	262(34)	216(175)	12(139)	-135(68)
C5C	-34951(150)	-4831(83)	-2659(72)	1476(192)	365(53)	366(40)	-281(198)	112(153)	-229(82)
C6C	-32914(158)	-4522(88)	3935(78)	1915(211)	395(57)	478(49)	-1882(195)	517(172)	-218(94)
C7C	-21853(140)	841(82)	8411(65)	1547(172)	396(56)	338(35)	-249(194)	666(121)	-89(79)
C1D	17228(114)	49368(71)	20665(56)	1081(133)	288(45)	269(29)	-46(144)	605(92)	24(63)
C2D	17715(146)	57243(76)	23175(58)	2871(199)	341(58)	204(29)	574(189)	558(121)	48(68)
C3D	4825(186)	60992(88)	22762(56)	2199(194)	540(62)	188(27)	745(207)	722(112)	38(74)
C4D	-8282(147)	54957(81)	19920(69)	1747(189)	379(55)	436(40)	481(194)	819(135)	367(79)
C5D	-8553(136)	49127(85)	17513(72)	1257(163)	423(59)	416(41)	268(187)	655(129)	158(87)
C6D	3768(120)	45393(82)	17771(68)	968(128)	434(58)	389(36)	182(166)	783(103)	54(84)
C1E	36786(113)	67002(66)	18739(53)	1031(119)	247(42)	233(25)	-138(135)	527(83)	58(57)
C2E	43961(126)	56203(73)	14912(57)	1243(150)	295(46)	253(30)	-115(163)	371(118)	25(67)
C3E	46285(138)	59829(74)	9745(68)	1545(169)	287(45)	325(32)	-43(178)	768(149)	135(78)
C4E	40511(141)	56527(80)	3074(65)	1629(172)	385(54)	374(35)	485(193)	887(118)	208(78)
C5E	33112(144)	89131(84)	2541(61)	1752(188)	461(59)	241(31)	-275(205)	599(121)	35(79)
C6E	31113(132)	45446(78)	7836(57)	1385(163)	386(53)	211(28)	-34(181)	398(129)	-43(68)

TABELA XVII - (continuação)

ATOMOS	x	y	z	$u(1,1)$	$u(2,2)$	$u(1,3)$	$u(1,2)$	$u(1,3)$	$u(2,3)$
-----	-	-	-	-----	-----	-----	-----	-----	-----
C1F	46183(143)	45744(81)	28462(60)	1504(165)	391(54)	207(31)	39(196)	95(129)	-105(71)
C2F	59712(134)	40907(78)	29373(60)	1103(162)	373(50)	215(31)	201(172)	-135(126)	1(72)
C3F	60452(137)	33314(76)	31975(71)	1150(172)	301(47)	430(42)	-191(176)	33(153)	320(78)
C4F	73254(155)	24919(85)	33407(81)	1365(191)	307(55)	524(52)	-110(200)	-60(160)	430(92)
C5F	84405(156)	32316(96)	32005(70)	1638(215)	590(74)	312(39)	512(241)	214(161)	271(96)
C6F	83079(147)	39627(91)	29315(70)	1421(180)	474(64)	341(40)	179(215)	290(145)	16(91)
C7F	70561(127)	44014(83)	27842(65)	941(140)	437(54)	330(37)	-304(169)	194(117)	202(81)
H1	-13767(0)	35111(0)	2672(0)	497699(0)					
H2	-6534(0)	41391(0)	-5563(0)	573921(0)					
H3	9680(0)	35002(0)	-9135(0)	529415(0)					
H4	19161(0)	22210(0)	-5165(0)	526362(0)					
H5	12556(0)	15796(0)	3194(0)	433373(0)					
H6	-1623(0)	27192(0)	14254(0)	416446(0)					
H7	-42827(0)	29740(0)	16873(0)	556266(0)					
H8	-61140(0)	27635(0)	5964(0)	530844(0)					
H9	-55333(0)	22344(0)	-2474(0)	422023(0)					
H10	-31541(0)	19875(0)	-1374(0)	405911(0)					
H11	-636(0)	8164(0)	15231(0)	337477(0)					
H12	6005(0)	8924(0)	9806(0)	337477(0)					
H13	-9674(0)	8042(0)	-2360(0)	374916(0)					
H14	-28257(0)	-411(0)	-10053(0)	434322(0)					
H15	-42207(0)	-8415(0)	-5481(0)	503220(0)					
H16	-42398(0)	-7335(0)	2653(0)	574884(0)					
H17	-19977(0)	690(0)	13224(0)	440113(0)					
H18	26801(0)	60243(0)	25195(0)	451659(0)					
H19	4750(0)	64335(0)	24575(0)	521266(0)					
H20	-16965(0)	59834(0)	19583(0)	533018(0)					
H21	-17955(0)	46364(0)	15544(0)	539951(0)					
H22	3283(0)	39943(0)	15763(0)	456039(0)					
H23	47874(0)	58411(0)	19417(0)	305153(0)					
H24	51402(0)	64994(0)	10229(0)	432481(0)					
H25	41742(0)	59134(0)	-424(0)	488895(0)					
H26	29312(0)	46772(0)	-2433(0)	459180(0)					
H27	35783(0)	41221(0)	7169(0)	470576(0)					
H28	42649(0)	44029(0)	32109(0)	435747(0)					
H29	48752(0)	51604(0)	29317(0)	435747(0)					
H30	52540(0)	30496(0)	33198(0)	468444(0)					
H31	73966(0)	23097(0)	35141(0)	572772(0)					
H32	93479(0)	29192(0)	33751(0)	522669(0)					
H33	90413(0)	42302(0)	28301(0)	527043(0)					
H34	69390(0)	49410(0)	25040(0)	433002(0)					

THE FORM OF THE ANISOTROPIC THERMAL PARAMETER IS
 $EXP[-(h(1,1)+h(2,2)+h(3,3)+L+L+B(1,2)+h(1,3)+h(2,3)+K+L)]$

TABELA XVIII - Fatores de estrutura observados e calculados
finais para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$

DICLO40-RIS (DIFENILRENTIL FOSFINOXIO) CORALTO (II)

PAGE 1

H	K	L	FORS	FCALC	H	K	L	FORS	FCALC	H	K	L	FORS	FCALC	H	K	L	FORS	FCALC	H	K	L	FORS	FCALC
-1	0	0	985	1221	0	2	20	372	375	0	5	7	209	168	0	8	0	400	379	0	11	2	130	112
-1	4	3	1766	1766	0	2	22	262	259	0	5	8	568	590	0	8	1	91	1209	0	11	3	490	423
0	0	2	1159	1199	0	2	23	128	148	0	5	9	140	153	0	8	2	310	3209	0	11	4	875	820
0	2	4	1457	1467	0	2	24	136	132	0	5	10	464	464	0	8	3	655	5022	0	11	6	847	817
0	4	6	1289	1354	0	3	1	347	336	0	5	11	600	642	0	8	4	102	855	0	11	7	447	412
0	6	8	1639	1613	0	3	2	1099	1205	0	5	12	538	569	0	8	5	133	121	0	11	8	348	318
0	2	10	1153	1143	0	3	3	2191	2000	0	5	13	171	197	0	8	6	158	107	0	11	9	131	168
0	2	12	569	501	0	3	4	232	240	0	5	14	234	251	0	8	7	534	407	0	11	11	222	201
0	2	14	124	163	0	3	5	966	939	0	5	15	441	422	0	8	9	105	73	0	11	12	203	170
0	2	16	528	527	0	3	6	781	768	0	5	17	116	110	0	8	10	371	320	0	11	14	122	129
0	2	18	213	189	0	3	7	199	194	0	5	18	174	192	0	8	11	264	245	0	11	15	159	176
0	2	20	134	134	0	3	8	680	973	0	5	20	196	162	0	8	13	426	450	0	11	16	198	189
0	2	22	137	147	0	3	10	1389	1326	0	5	22	153	147	0	8	15	150	130	0	11	17	133	121
0	1	1	147	140	0	3	11	768	800	0	6	0	1696	1657	0	8	16	285	291	0	12	0	492	534
0	1	2	1226	1243	0	3	12	493	535	0	6	1	1273	1226	0	8	18	134	1209	0	12	1	374	384
0	1	3	752	605	0	3	13	412	440	0	6	2	702	669	0	8	20	322	3209	0	12	2	619	621
0	1	4	358	346	0	3	14	590	632	0	6	3	947	861	0	8	21	127	1209	0	12	3	278	285
0	1	5	299	314	0	3	17	176	177	0	6	4	553	539	0	8	22	176	201	0	12	4	353	338
0	1	6	188	224	0	3	18	213	186	0	6	5	306	275	0	9	1	475	475	0	12	7	215	195
0	1	7	152	121	0	3	20	150	162	0	6	6	494	423	0	9	2	874	874	0	12	8	232	187
0	1	8	928	1204	0	4	0	3235	3043	0	6	7	462	459	0	9	4	1003	953	0	12	9	262	263
0	1	10	888	858	0	4	1	229	224	0	6	8	327	274	0	9	5	301	275	0	12	12	202	209
0	1	11	176	162	0	4	2	595	521	0	6	9	341	335	0	9	6	1019	1019	0	12	14	202	216
0	1	12	162	167	0	4	3	94	80	0	6	12	249	251	0	9	8	305	270	0	12	17	176	159
0	1	14	177	167	0	4	4	179	131	0	6	13	295	281	0	9	9	143	152	0	12	19	151	150
0	1	15	120	111	0	4	5	705	613	0	6	14	331	348	0	9	10	111	135	0	12	20	117	117
0	1	16	243	284	0	4	6	341	307	0	6	16	544	618	0	9	11	503	501	0	13	4	239	222
0	1	17	224	224	0	4	7	234	188	0	6	18	353	372	0	9	12	364	357	0	13	6	180	158
0	1	18	186	175	0	4	8	66	66	0	6	20	243	233	0	9	13	160	152	0	13	8	230	232
0	1	22	162	124	0	4	9	621	414	0	6	21	156	174	0	9	15	199	170	0	13	9	338	303
0	2	0	1151	1126	0	4	10	366	342	0	6	22	109	60	0	9	22	117	126	0	13	10	230	235
0	2	1	343	316	0	4	11	749	772	0	7	1	800	731	0	10	0	1123	1050	0	13	11	422	421
0	2	2	297	162	0	4	13	240	212	0	7	3	448	409	0	10	1	568	563	0	13	12	384	383
0	2	3	1318	1254	0	4	14	162	194	0	7	4	81	84	0	10	2	722	606	0	13	14	193	227
0	2	4	513	473	0	4	15	223	223	0	7	5	76	61	0	10	3	308	297	0	13	19	129	98
0	2	5	759	811	0	4	16	507	521	0	7	6	114	86	0	10	4	865	838	0	14	8	154	167
0	2	6	555	554	0	4	18	301	323	0	7	7	710	664	0	10	5	189	171	0	14	8	284	282
0	2	7	675	761	0	4	19	260	272	0	7	8	137	125	0	10	6	674	479	0	14	6	129	128
0	2	9	365	385	0	4	20	364	350	0	7	9	128	86	0	10	7	231	208	0	14	9	315	312
0	2	10	96	64	0	4	21	335	309	0	7	10	492	445	0	10	8	612	552	0	14	10	231	238
0	2	12	429	416	0	4	22	139	136	0	7	11	512	486	0	10	11	250	261	0	14	18	184	183
0	2	13	192	196	0	5	1	983	951	0	7	12	573	559	0	10	12	346	347	0	15	3	234	235
0	2	14	482	471	0	5	2	922	860	0	7	13	130	145	0	10	13	201	206	0	15	5	454	472
0	2	15	118	149	0	5	3	187	187	0	7	14	334	341	0	10	14	310	288	0	15	6	285	272
0	2	16	229	246	0	5	4	737	626	0	7	15	483	522	0	10	20	185	173	0	15	9	184	204
0	2	18	439	431	0	5	5	83	47	0	7	16	184	190	0	10	21	173	145	0	15	11	181	202
0	2	19	140	164	0	5	6	247	223	0	7	22	135	139	0	11	1	247	243	0	15	12	261	262

TABELA XVIII - (continuação)

DICLOMO-RIS (DIFENILPENZIL FOSFINOXIDO) COBALTO (II)

PAGE 2

P	K	L	FOR3	FCALC	H	K	L	FOR3	FCALC	H	K	L	FOR3	FCALC	H	K	L	FOR3	FCALC	H	K	L	FOR3	FCALC
P 15 15			149	134	1	1	-6	1439	1207	1	3	-20	391	424	1	4	-1	340	323	1	6	-10	735	756
P 15 1			306	307	1	1	-5	1575	1712	1	3	-18	635	679	1	4	0	155	261	1	6	-8	1176	1189
P 16 4			281	282	1	1	-4	839	849	1	3	-17	362	341	1	4	1	111	116	1	6	-7	1046	1090
P 16 12			160	222	1	1	-3	94	198	1	3	-16	242	212	1	4	2	343	295	1	6	-6	604	597
P 16 14			252	244	1	1	-2	1497	1802	1	3	-13	334	362	1	4	3	549	514	1	6	-4	153	123
P 16 14			139	164	1	1	-1	272	310	1	3	-12	145	140	1	4	4	552	494	1	6	-3	333	273
P 17 3			282	293	1	1	0	453	929	1	3	-11	410	449	1	4	5	393	344	1	6	-2	1024	994
P 17 5			199	186	1	1	1	959	975	1	3	-10	279	255	1	4	7	544	523	1	6	-1	461	436
P 17 9			349	343	1	1	2	923	1037	1	3	-8	380	357	1	4	8	144	126	1	6	1	150	165
P 18 0			267	299	1	1	3	860	734	1	3	-7	248	246	1	4	9	386	384	1	6	2	175	198
P 18 1			282	295	1	1	4	1119	992	1	3	-6	517	444	1	4	10	525	539	1	6	3	345	374
P 18 11			173	194	1	1	5	942	836	1	3	-5	661	636	1	4	12	768	853	1	6	6	174	210
P 19 0			140	149	1	1	6	607	452	1	3	-4	1668	1678	1	4	13	226	229	1	6	7	234	224
P 20 0			412	447	1	1	7	327	294	1	3	-3	594	567	1	4	14	416	454	1	6	8	945	864
P 20 1			183	169	1	1	8	942	927	1	3	-2	854	915	1	4	15	354	365	1	6	9	975	945
P 20 2			129	143	1	1	10	214	234	1	3	-1	498	503	1	4	17	240	252	1	6	10	714	684
P 20 3			621	512	1	1	10	450	431	1	3	0	690	699	1	5	20	231	247	1	6	12	570	564
P 20 22			368	133	1	1	16	365	355	1	3	1	1102	1066	1	5	18	388	421	1	6	14	503	531
P 20 16			226	299	1	1	23	141	122	1	3	2	1327	1136	1	5	15	321	355	1	6	16	186	203
P 20 16			282	245	1	2	-20	227	232	1	3	3	650	510	1	5	14	226	248	1	6	20	246	243
P 20 14			547	621	1	2	-17	326	327	1	3	4	594	450	1	5	12	248	282	1	6	22	145	164
P 20 12			137	117	1	2	-16	575	482	1	3	5	531	490	1	5	11	287	259	1	7	-22	163	176
P 20 10			891	997	1	2	-13	171	140	1	3	6	134	48	1	5	10	355	361	1	7	-20	245	255
P 20 8			934	1021	1	2	-12	693	705	1	3	7	371	325	1	5	9	444	514	1	7	-18	523	559
P 20 6			1433	2072	1	2	-11	271	253	1	3	9	447	470	1	5	8	413	395	1	7	-13	246	272
P 20 4			1948	2312	1	2	-8	466	534	1	3	12	237	277	1	5	7	164	184	1	7	-11	166	170
P 20 2			1145	1413	1	2	-7	939	943	1	3	15	342	422	1	5	6	424	425	1	7	-9	466	482
P 20 0			509	486	1	2	-5	784	741	1	3	16	310	362	1	5	5	544	480	1	7	-8	195	219
P 20 2			353	296	1	2	-4	484	516	1	3	17	143	164	1	5	4	1178	1102	1	7	-7	384	415
P 20 4			2315	2245	1	2	-3	483	467	1	3	18	443	499	1	5	3	75	74	1	7	-6	146	194
P 20 6			2423	2327	1	2	-2	359	344	1	3	19	257	265	1	5	2	1317	1350	1	7	-5	560	511
P 20 8			1442	1357	1	2	-1	980	947	1	3	20	327	363	1	5	1	293	314	1	7	-4	486	494
P 20 12			895	805	1	2	0	943	951	1	3	22	217	239	1	5	0	742	699	1	7	-3	240	294
P 20 12			631	634	1	2	1	531	426	1	4	-20	333	380	1	5	1	315	351	1	7	-2	581	578
P 20 14			348	334	1	2	2	1704	1572	1	4	-15	660	662	1	5	2	156	116	1	7	0	196	178
P 20 16			497	467	1	2	3	797	661	1	4	-13	562	584	1	5	4	226	222	1	7	1	1380	1299
P 20 18			561	545	1	2	4	741	536	1	4	-12	529	581	1	5	5	301	212	1	7	2	212	227
P 20 22			385	454	1	2	5	262	234	1	4	-11	524	571	1	5	6	281	283	1	7	3	432	424
P 20 16			426	472	1	2	6	263	279	1	4	-10	1271	1294	1	5	12	203	195	1	7	4	223	234
P 20 16			252	263	1	2	7	146	164	1	4	-9	149	172	1	5	14	121	160	1	7	9	237	250
P 20 14			323	331	1	2	8	813	849	1	4	-8	942	1015	1	5	16	599	641	1	7	10	359	321
P 20 12			578	561	1	2	9	268	254	1	4	-7	200	150	1	5	18	196	189	1	7	11	324	296
P 20 11			155	44	1	2	12	356	329	1	4	-6	431	664	1	5	20	258	277	1	7	12	297	304
P 20 10			382	415	1	2	13	115	143	1	4	-5	1056	1051	1	6	21	134	169	1	7	13	175	169
P 20 9			250	236	1	2	14	244	264	1	4	-4	149	139	1	6	17	299	300	1	7	17	186	173
P 20 8			828	829	1	2	15	191	187	1	4	-3	1717	1766	1	6	14	159	189	1	7	18	349	382
P 20 7			758	670	1	2	16	192	210	1	4	-2	1334	1272	1	6	12	606	649	1	7	20	268	274

TABELA XVIII - (continuação)

DICLORO-BIS (DIFENILRENZIL FOSFINOXIMO) COBALTO (II)

PAGE 3

M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC
1	0-24		254	243	1	10-9		397	407	1	12-9		527	495	1	16-10		250	273
1	0-17		254	242	1	10-8		683	656	1	12-10		518	457	1	16-13		246	262
1	0-16		420	425	1	10-7		294	287	1	13-20		104	121	1	17-11		230	219
1	0-13		121	137	1	10-6		769	764	1	13-19		151	162	1	17-6		148	188
1	0-12		545	577	1	10-5		155	151	1	13-16		373	313	1	17-3		179	159
1	0-12		312	327	1	10-4		589	654	1	13-15		226	221	1	17-1		363	380
1	0-8		546	564	1	10-3		567	555	1	13-14		127	144	1	17-1		234	231
1	0-7		551	534	1	10-2		714	696	1	13-10		116	172	1	17-3		255	242
1	0-6		523	551	1	10-1		277	291	1	13-6		401	427	1	17-5		230	243
1	0-4		217	143	1	10-0		554	530	1	13-5		144	210	1	17-8		172	206
1	0-3		236	222	1	10-4		447	782	1	13-4		341	369	1	17-9		235	239
1	0-2		532	521	1	10-6		461	440	1	13-3		147	210	1	18-11		156	161
1	0-1		491	454	1	10-8		722	697	1	13-1		254	294	1	18-3		247	257
1	0-0		242	228	1	10-9		245	272	1	13-0		224	182	1	18-7		310	330
1	0-1		566	495	1	10-10		709	624	1	13-8		317	312	1	18-9		144	195
1	0-2		294	271	1	11-22		146	120	1	13-13		204	211	1	19-9		144	141
1	0-5		349	322	1	11-15		230	235	1	13-10		200	219	1	19-3		112	123
1	0-7		198	147	1	11-10		430	437	1	14-14		254	256	1	19-2		181	199
1	0-9		659	619	1	11-9		350	357	1	14-13		206	202	1	19-1		210	259
1	0-10		544	491	1	11-8		748	791	1	14-11		436	454	1	19-3		193	204
1	0-11		451	407	1	11-7		466	458	1	14-9		378	366	1	19-5		172	195
1	0-13		263	252	1	11-5		146	156	1	14-8		339	342	1	20-4		241	264
1	0-23		151	154	1	11-4		252	257	1	14-6		259	272	1	20-2		222	254
1	0-22		232	239	1	11-2		417	369	1	14-5		259	252	1	20-6		210	241
1	0-21		244	260	1	11-1		564	576	1	14-3		302	304	2	0-20		475	443
1	0-14		216	224	1	11-7		812	822	1	14-1		256	229	2	0-18		292	279
1	0-13		542	543	1	11-1		715	678	1	14-6		261	218	2	0-16		239	224
1	0-12		344	345	1	11-2		955	951	1	14-8		210	216	2	0-12		271	332
1	0-9		275	241	1	11-3		271	278	1	14-10		252	245	2	0-10		269	222
1	0-8		374	343	1	11-4		306	294	1	15-17		196	235	2	0-8		970	1060
1	0-6		143	143	1	11-5		239	240	1	15-16		224	268	2	0-6		738	877
1	0-5		244	247	1	11-8		194	161	1	15-14		142	201	2	0-4		777	432
1	0-4		642	422	1	11-9		387	367	1	15-6		387	392	2	0-2		142	224
1	0-2		508	535	1	11-10		433	433	1	15-5		272	302	2	0-0		919	1013
1	0-0		1312	1193	1	11-12		577	582	1	15-4		275	268	2	0-2		3467	3242
1	0-1		451	794	1	11-14		205	240	1	15-1		204	217	2	0-4		440	794
1	0-2		1298	1254	1	11-19		127	131	1	15-8		246	250	2	0-6		619	536
1	0-3		342	365	1	12-16		270	226	1	15-16		222	232	2	0-8		323	336
1	0-4		315	377	1	12-8		336	356	1	16-11		258	270	2	0-10		414	403
1	0-6		231	146	1	12-7		365	361	1	16-10		293	340	2	0-12		600	572
1	0-11		348	320	1	12-6		551	559	1	16-8		320	341	2	0-14		818	796
1	0-12		487	443	1	12-2		255	241	1	16-7		200	206	2	0-16		230	237
1	0-16		267	267	1	12-2		341	336	1	16-6		319	354	2	0-18		262	287
1	0-18		212	230	1	12-4		528	507	1	16-2		187	220	2	0-20		227	243
1	12-13		302	296	1	12-6		315	298	1	16-4		222	187	2	1-20		278	253
1	12-12		222	239	1	12-7		481	489	1	16-7		327	349	2	1-16		291	280
1	12-10		352	347	1	12-8		263	262	1	16-9		232	239	2	1-5		339	373

TABELA XVIII - (continuação)

CICLOMO-915 (OIFENILBENZIL FOSFINOXID) CORALTO (II)

PAGE 4

M	K	L	FOHS	FCALC	M	K	L	FOHS	FCALC	M	K	L	FOHS	FCALC	M	K	L	FOHS	FCALC
2	2	6	497	496	2	4	1	868	708	2	6	-4	925	968	2	8	-6	636	647
2	2	7	143	138	2	4	2	437	375	2	6	-2	1364	1320	2	8	-5	963	958
2	2	8	315	245	2	4	3	1171	1057	2	6	0	167	232	2	8	-4	283	289
2	2	13	291	297	2	4	4	525	395	2	6	1	253	240	2	8	-3	293	344
2	2	14	243	214	2	4	6	202	182	2	6	2	529	490	2	8	-2	629	618
2	2	16	241	269	2	4	7	846	811	2	6	3	209	207	2	8	-1	670	631
2	2	20	345	235	2	4	9	321	253	2	6	6	192	147	2	8	0	666	594
2	3	-12	279	304	2	4	13	380	429	2	6	8	391	356	2	8	1	790	838
2	3	-14	342	451	2	4	15	299	325	2	6	14	338	330	2	8	2	175	119
2	3	-12	1256	1124	2	4	18	274	313	2	6	15	192	202	2	8	4	242	237
2	3	-11	218	244	2	4	23	145	153	2	6	17	236	223	2	8	5	428	384
2	3	-12	421	499	2	5	-19	342	348	2	6	18	394	438	2	8	7	140	127
2	3	-9	326	339	2	5	-14	421	421	2	6	20	231	246	2	8	8	254	206
2	3	-8	923	954	2	5	-16	492	525	2	6	22	166	174	2	8	9	277	221
2	3	-6	189	215	2	5	-13	175	152	2	7	-24	181	200	2	9	-19	203	194
2	3	-4	791	423	2	5	-12	736	720	2	7	-23	226	221	2	9	-15	211	222
2	3	-3	134	121	2	5	-11	487	494	2	7	-14	327	337	2	9	-11	398	416
2	3	-2	748	704	2	5	-10	925	974	2	7	-13	156	169	2	9	-10	476	485
2	3	-1	785	741	2	5	-9	1358	1372	2	7	-12	428	500	2	9	-9	539	563
2	3	0	1386	1245	2	5	-8	1211	1204	2	7	-10	844	849	2	9	-8	498	486
2	3	1	884	828	2	5	-7	315	286	2	7	-9	272	285	2	9	-7	612	588
2	3	2	1226	1125	2	5	-6	742	756	2	7	-8	179	835	2	9	-6	435	474
2	3	3	190	74	2	5	-5	215	142	2	7	-7	272	247	2	9	-5	158	177
2	3	4	822	499	2	5	-4	169	179	2	7	-6	399	328	2	9	-4	337	329
2	3	5	955	850	2	5	-3	852	781	2	7	-5	417	336	2	9	-3	389	386
2	3	6	589	357	2	5	-2	466	374	2	7	-4	1052	987	2	9	-2	209	177
2	3	8	691	480	2	5	-1	219	298	2	7	-3	306	271	2	9	-1	466	439
2	3	10	762	744	2	5	0	242	262	2	7	2	603	554	2	9	2	354	357
2	3	11	510	315	2	5	1	179	188	2	7	3	461	436	2	9	3	192	176
2	3	12	432	442	2	5	2	160	143	2	7	4	448	421	2	9	4	468	444
2	4	-20	329	355	2	5	3	225	285	2	7	5	916	869	2	9	5	935	898
2	4	-19	324	272	2	5	4	449	376	2	7	6	556	454	2	9	6	298	262
2	4	-17	327	322	2	5	5	439	384	2	7	7	942	794	2	9	7	410	393
2	4	-16	466	407	2	5	6	979	868	2	7	8	319	283	2	9	8	160	152
2	4	-14	494	540	2	5	7	215	193	2	7	9	479	428	2	9	9	320	313
2	4	-13	256	215	2	5	8	784	642	2	7	10	255	249	2	9	10	113	113
2	4	-12	452	440	2	5	9	474	545	2	7	11	256	280	2	9	11	271	240
2	4	-9	429	343	2	5	10	286	296	2	7	12	154	176	2	9	12	590	585
2	4	-8	242	142	2	5	11	233	252	2	7	13	130	129	2	9	13	353	337
2	4	-7	449	634	2	5	12	143	168	2	7	14	266	260	2	9	14	242	207
2	4	-6	457	455	2	5	13	384	322	2	7	15	390	392	2	9	15	264	291
2	4	-5	641	583	2	5	14	262	236	2	7	16	297	323	2	9	16	321	315
2	4	-4	1127	1164	2	5	15	184	242	2	7	17	325	333	2	9	17	505	493
2	4	-3	1379	1263	2	5	16	247	266	2	7	18	351	356	2	9	18	317	317
2	4	-2	624	662	2	5	17	252	298	2	7	19	351	364	2	9	19	721	715
2	4	-1	316	271	2	5	18	253	247	2	7	20	284	197	2	9	20	506	471
2	4	0	1491	1317	2	5	19	605	613	2	7	21	344	350	2	9	21	751	725

TABELA XVIII - (continuação)

DICLORO-HIS (DIFENTILRENZIL FOSFINOXIDO) COBALTO (II)

PAGE 5

M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC
2 11 19			96	119	2 14 -3			478	487	2 18-14			189	120	3 1 -3			392	419	3 3-12			285	275
2 11 19			96	110	2 14 -2			314	328	2 18 -8			169	167	3 1 -2			161	155	3 3-11			350	326
2 12-27			141	120	2 14 5			232	171	2 18 -6			183	163	3 1 -1			185	151	3 3-10			581	562
2 12-18			269	272	2 14 6			177	164	2 18 -3			219	259	3 1 0			1250	1303	3 3 -9			235	192
2 12 -6			454	448	2 14 7			338	334	2 18 -2			245	271	3 1 1			472	505	3 3 -8			743	740
2 12 -7			594	613	2 14 16			146	156	2 18 1			243	273	3 1 2			1723	1615	3 3 -7			651	683
2 12 -6			186	197	2 15-13			271	268	2 18 3			370	359	3 1 3			316	370	3 3 -6			465	506
2 12 -3			331	353	2 15-11			379	386	2 19-11			173	176	3 1 4			853	772	3 3 -4			1066	1112
2 12 -2			324	424	2 15-10			188	190	2 19 -5			149	180	3 1 5			257	225	3 3 -3			634	697
2 12 -1			522	521	2 15 -9			154	157	2 19 5			198	225	3 1 6			401	376	3 3 -2			1631	1562
2 12 2			332	316	2 15 -8			386	393	2 19 8			111	118	3 1 7			205	173	3 3 -1			1136	1064
2 12 1			353	341	2 15 -7			265	238	2 20 -8			119	110	3 1 8			202	174	3 3 0			352	397
2 12 2			387	387	2 15 -5			204	233	2 20 -5			110	119	3 1 9			501	424	3 3 1			194	127
2 12 3			369	345	2 15 -4			372	396	2 20 -4			132	159	3 1 10			390	365	3 3 2			495	648
2 12 4			236	249	2 15 -3			225	196	2 20 2			219	234	3 1 12			620	596	3 3 4			240	172
2 12 6			625	622	2 15 -1			220	224	2 20 4			174	212	3 1 16			261	271	3 3 6			437	400
2 12 12			237	230	2 15 2			285	282	3 0-20			168	183	3 1 18			406	419	3 3 8			437	400
2 12 15			284	290	2 15 7			163	175	3 0-14			474	465	3 2-10			460	494	3 3 9			246	214
2 13-23			185	178	2 15 8			310	295	3 0-10			682	728	3 2-15			143	147	3 3 10			265	235
2 13-16			219	219	2 15 10			183	165	3 0 -8			672	691	3 2-14			433	521	3 3 11			295	268
2 13-14			210	232	2 15 11			170	175	3 0 -6			181	106	3 2-12			557	646	3 3 18			310	318
2 13-13			137	205	2 15 12			172	186	3 0 -4			486	515	3 2-11			410	462	3 3 22			141	159
2 13-12			255	283	2 15 18			196	192	3 0 0			1706	1708	3 2-10			1013	1044	3 4-18			285	251
2 13-11			322	351	2 15-18			189	199	3 0 2			285	272	3 2 -9			131	212	3 4-15			390	375
2 13-10			459	443	2 15-12			276	276	3 0 4			229	163	3 2 -8			691	812	3 4-13			216	197
2 13 -9			461	459	2 15-10			311	316	3 0 6			1152	1050	3 2 -7			102	54	3 4-12			487	498
2 13 -8			594	579	2 15 -8			210	225	3 0 8			1434	1339	3 2 -6			164	166	3 4-10			1324	1349
2 13 -6			232	230	2 15 -6			277	280	3 0 10			1145	1061	3 2 -5			346	370	3 4 -9			725	716
2 13 -5			292	322	2 15 -5			188	201	3 0 12			616	646	3 2 -4			785	827	3 4 -8			1151	1172
2 13 -3			174	174	2 15 -4			246	236	3 0 14			372	349	3 2 -3			107	24	3 4 -7			155	138
2 13 -1			284	269	2 15 -3			225	207	3 0 18			323	326	3 2 -2			348	289	3 4 -6			671	671
2 13 2			227	238	2 16 -2			239	223	3 0 20			279	281	3 2 -1			199	155	3 4 -5			293	223
2 13 5			363	325	2 16 -1			237	257	3 1-24			200	193	3 2 1			321	243	3 4 -4			193	242
2 13 6			226	196	2 16 0			299	270	3 1-22			302	339	3 2 2			197	177	3 4 -1			1218	1188
2 13 8			250	234	2 16 3			289	272	3 1-20			362	355	3 2 3			255	199	3 4 0			207	181
2 13 16			129	117	2 16 6			306	318	3 1-18			327	346	3 2 5			396	389	3 4 1			793	782
2 14-19			199	200	2 16 13			162	143	3 1-17			446	417	3 2 6			213	201	3 4 2			419	379
2 14-18			179	155	2 16 14			119	146	3 1-16			324	349	3 2 7			118	75	3 4 3			159	163
2 14-17			183	222	2 17-10			209	231	3 1-15			385	377	3 2 8			616	569	3 4 4			883	815
2 14-16			156	176	2 17 -8			236	259	3 1-14			270	273	3 2 10			1031	874	3 4 5			699	646
2 14-15			157	160	2 17 -5			225	232	3 1-14			290	273	3 2 13			227	204	3 4 6			933	865
2 14 -9			251	254	2 17 1			299	290	3 1-12			526	571	3 2 17			125	137	3 4 7			199	285
2 14 -8			317	322	2 17 4			160	183	3 1-10			481	491	3 3-20			390	387	3 4 8			489	457
2 14 -7			259	252	2 17 5			357	352	3 1 -9			469	515	3 3-19			161	154	3 4 9			312	298
2 14 -6			322	297	2 17 7			147	156	3 1 -7			434	501	3 3-18			415	408	3 4 10			455	431
2 14 -5			298	193	2 17 9			176	204	3 1 -5			553	610	3 3-16			546	575	3 4 12			188	189
2 14 -4			284	319	2 17 11			272	281	3 1 -4			339	399	3 3-13			233	278	3 5-21			262	267

TABELA XVIII - (continuação)

DICLORO-BIS (DIFENILREZIL FOSFINOXIDO) CORALTO (II)

PAGE 6

H	K	L	FORS	FCALC	H	K	L	FORS	FCALC	H	K	L	FORS	FCALC	H	K	L	FORS	FCALC
3	5-19		417	387	3	6	7	204	217	3	8	-5	262	249	3	10	10	574	545
3	5-18		407	411	3	6	8	645	610	3	8	-4	140	155	3	10	12	469	420
3	5-17		332	315	3	6	9	347	323	3	8	-2	227	279	3	10	16	209	196
3	5-16		122	114	3	6	10	519	516	3	8	-1	265	253	3	10	18	141	167
3	5-15		442	433	3	6	11	302	242	3	8	0	231	255	3	11-20	254	272	272
3	5-14		175	147	3	6	12	199	184	3	8	3	580	533	3	11-15	160	190	190
3	5-13		331	343	3	6	13	541	508	3	8	4	431	401	3	11-10	311	331	331
3	5-12		341	342	3	6	17	214	226	3	8	6	816	739	3	11-9	193	199	199
3	5-11		304	306	3	6	21	111	111	3	8	7	181	129	3	11-6	475	443	443
3	5-10		275	337	3	7-20	247	252	3	8	11	249	293	3	11-4	160	145	145	145
3	5-9		355	345	3	7-14	466	498	3	8	13	305	290	3	11-1	297	309	309	309
3	5-8		501	565	3	7-15	405	452	3	9-21	284	297	3	11-2	250	243	243	243	243
3	5-7		403	347	3	7-14	227	246	3	9-20	324	350	3	11-4	951	914	914	914	914
3	5-6		543	542	3	7-12	425	462	3	9-19	439	450	3	11-6	314	296	296	296	296
3	5-5		137	142	3	7-11	181	194	3	9-18	250	281	3	11-14	346	395	395	395	395
3	5-4		246	145	3	7-10	254	204	3	9-10	197	195	3	11-16	217	246	246	246	246
3	5-3		313	273	3	7-4	246	191	3	9-9	141	153	3	12-22	144	146	146	146	146
3	5-2		612	543	3	7-7	459	474	3	9-4	295	254	3	12-12	243	303	303	303	303
3	5-1		276	212	3	7-6	590	610	3	9-3	363	374	3	12-10	498	505	505	505	505
3	5-10		257	219	3	7-5	293	316	3	9-2	481	494	3	12-7	243	275	275	275	275
3	5-11		198	140	3	7-4	982	983	3	9-1	399	394	3	12-3	314	330	330	330	330
3	5-12		213	241	3	7-2	1072	961	3	9-2	425	459	3	12-7	205	213	213	213	213
3	5-13		261	243	3	7-2	146	961	3	9-4	804	829	3	12-1	326	369	369	369	369
3	5-14		194	230	3	7-1	296	315	3	9-6	202	240	3	12-1	195	190	190	190	190
3	5-15		311	354	3	7-2	653	628	3	9-7	343	297	3	12-2	320	280	280	280	280
3	5-16		189	123	3	7-1	317	294	3	9-8	307	295	3	12-6	559	598	598	598	598
3	5-17		124	142	3	7-2	629	550	3	9-11	337	285	3	12-7	222	202	202	202	202
3	5-18		180	157	3	7-3	537	524	3	9-14	275	280	3	12-9	343	341	341	341	341
3	5-19		166	193	3	7-4	123	89	3	9-14	180	173	3	12-11	238	233	233	233	233
3	6-14		290	255	3	7-5	615	621	3	10-21	121	107	3	12-12	195	231	231	231	231
3	6-15		244	228	3	7-6	329	291	3	10-18	273	279	3	13-21	128	110	110	110	110
3	6-16		284	322	3	7-13	395	258	3	10-17	123	122	3	13-20	244	227	227	227	227
3	6-17		404	444	3	7-14	211	188	3	10-11	343	353	3	13-18	215	209	209	209	209
3	6-18		654	494	3	7-15	416	434	3	10-10	152	165	3	13-16	243	282	282	282	282
3	6-19		824	876	3	7-16	199	233	3	10-9	218	213	3	13-15	148	153	153	153	153
3	6-20		343	326	3	7-20	127	144	3	10-8	147	160	3	13-14	242	249	249	249	249
3	6-21		345	474	3	8-24	150	138	3	10-7	226	229	3	13-9	284	286	286	286	286
3	6-22		347	282	3	8-22	275	255	3	10-6	233	249	3	13-8	352	331	331	331	331
3	6-23		554	247	3	8-16	159	150	3	10-4	408	420	3	13-7	219	235	235	235	235
3	6-24		337	342	3	8-14	246	225	3	10-2	377	359	3	13-6	231	214	214	214	214
3	6-25		325	293	3	8-13	292	305	3	10-1	294	212	3	13-5	283	295	295	295	295
3	6-26		561	594	3	8-12	440	430	3	10-0	395	447	3	13-4	612	619	619	619	619
3	6-27		330	242	3	8-11	369	407	3	10-2	677	651	3	13-3	503	455	455	455	455
3	6-28		488	404	3	8-10	996	970	3	10-5	347	316	3	13-2	400	405	405	405	405
3	6-29		563	497	3	8-8	272	289	3	10-6	855	807	3	13-1	560	563	563	563	563
3	6-30		154	134	3	8-7	236	255	3	10-7	411	413	3	13-1	490	506	506	506	506
3	6-31		445	403	3	8-6	270	277	3	10-8	1061	959	3	13-5	357	329	329	329	329

TABELA XVIII - (continuação)

DIFENILANIL FOSFINOXIDO CONALTO (II)

PAGE 7

M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC
3 17 8			129	146	4 1 -5			258	283	4 3 -4			346	405	4 5 -4			140	169
3 17 11			136	133	4 1 -4			331	279	4 3 -3			529	489	4 5 -3			757	741
3 18-14			141	125	4 1 -3			209	159	4 3 -2			293	276	4 5 -1			530	472
3 18-12			124	119	4 1 -2			786	768	4 3 -1			725	648	4 5 0			546	539
3 18-11			136	139	4 1 0			549	591	4 3 0			1002	1002	4 5 1			193	169
3 18-10			159	146	4 1 2			131	87	4 3 1			162	101	4 5 2			589	620
3 18 -9			163	145	4 1 3			149	122	4 3 2			371	459	4 5 3			274	252
3 18 -8			176	160	4 1 4			288	387	4 3 3			349	404	4 5 6			778	755
3 18 -7			134	160	4 1 5			366	336	4 3 4			178	107	4 5 7			275	261
3 18 -1			279	216	4 1 6			901	801	4 3 5			659	658	4 5 8			316	325
3 18 2			226	190	4 1 8			1160	1055	4 3 6			657	677	4 5 10			425	413
3 18 4			193	225	4 1 12			534	479	4 3 8			590	552	4 5 11			167	152
3 18 9			155	145	4 1 12			247	278	4 3 10			207	204	4 5 13			203	215
3 19 -7			212	214	4 1 14			293	281	4 3 13			284	232	4 5 14			176	178
3 19 -5			124	163	4 1 16			166	144	4 3 15			250	236	4 5 18			145	151
3 19 1			197	238	4 2-20			359	355	4 3 16			128	103	4 6-18			262	241
3 19 2			149	165	4 2-18			481	458	4 3 20			136	144	4 6-13			193	185
3 19 5			152	129	4 2-17			255	279	4 4-18			318	329	4 6 -9			203	228
3 20 -2			177	193	4 2-16			358	397	4 4-15			302	297	4 6 -7			833	786
3 20 2			210	195	4 2-10			160	131	4 4-14			301	282	4 6 -6			190	170
4 2-21			521	492	4 2 -9			226	263	4 4-11			185	162	4 6 -5			188	187
4 2-14			861	815	4 2 -8			411	426	4 4-10			184	179	4 6 -3			705	477
4 2-15			165	135	4 2 -7			737	825	4 4 -9			162	169	4 6 -2			969	1002
4 2-12			175	166	4 2 -5			403	414	4 4 -8			458	467	4 6 0			1258	1256
4 2-17			152	116	4 2 -4			202	177	4 4 -6			207	216	4 6 1			568	547
4 2 -8			173	137	4 2 -3			185	178	4 4 -5			538	598	4 6 2			694	685
4 2 -5			208	285	4 2 -2			845	921	4 4 -4			556	558	4 6 3			662	648
4 2 -4			920	856	4 2 0			1521	1621	4 4 -3			912	896	4 6 6			224	182
4 2 -2			585	631	4 2 1			378	389	4 4 -2			795	897	4 6 8			215	188
4 2 0			740	748	4 2 2			243	248	4 4 -1			517	478	4 6 9			339	334
4 2 2			675	391	4 2 3			643	660	4 4 0			1230	1207	4 6 10			283	255
4 2 4			216	214	4 2 4			514	565	4 4 1			365	337	4 6 17			230	251
4 2 6			1209	941	4 2 5			323	391	4 4 2			897	924	4 6 19			218	257
4 2 12			222	224	4 2 6			265	268	4 4 3			136	142	4 7-18			293	285
4 2 16			641	548	4 2 8			515	477	4 4 5			781	807	4 7-17			160	143
4 2 18			244	319	4 2 18			276	279	4 4 7			402	407	4 7-16			247	256
4 2 22			158	164	4 3-22			171	155	4 4 8			443	496	4 7-13			356	353
4 3-22			117	114	4 3-20			365	329	4 4 16			251	240	4 7-12			543	506
4 3-17			177	202	4 3-18			459	436	4 4 20			175	202	4 7-11			197	159
4 3-16			342	368	4 3-17			471	481	4 5-24			177	129	4 7-10			484	514
4 3-14			287	278	4 3-14			240	263	4 5-13			331	327	4 7 -9			331	303
4 3-12			599	598	4 3-12			882	922	4 5-12			291	309	4 7 -8			634	652
4 3-11			457	486	4 3-10			1188	1240	4 5-10			684	702	4 7 -7			165	157
4 3-10			618	718	4 3 -8			905	1000	4 5 -9			390	413	4 7 -6			708	692
4 3 -9			295	285	4 3 -7			713	713	4 5 -8			475	513	4 7 -5			405	359
4 3 -5			114	114	4 3 -6			550	585	4 5 -7			412	465	4 7 -3			738	715
4 3 -6			359	337	4 3 -5			478	481	4 5 -6			334	416	4 7 -2			502	545

TABELA XVIII - (continuação)

DICLORO-BIS (DIFENILREZIL FOSFINOXIDO) COBALTO (II)

PAGE 8

M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC
4 9 -1			499	519	4 11 10			477	427	4 14 0			235	244	5 0 4			469	444
4 9 2			315	256	4 11 11			292	230	4 14 2			270	260	5 0 6			353	339
4 9 1			421	413	4 11 12			247	240	4 14 3			144	110	5 0 10			372	374
4 9 2			241	242	4 12 -22			173	140	4 14 7			230	200	5 0 12			649	609
4 9 4			311	342	4 12 -20			177	154	4 14 9			202	214	5 0 14			247	244
4 9 6			417	419	4 12 -16			352	334	4 15 -11			312	334	5 1 -23			194	159
4 9 10			404	344	4 12 -15			194	187	4 15 -9			234	239	5 1 -22			291	272
4 9 11			434	394	4 12 -14			339	330	4 15 -7			200	232	5 1 -20			549	524
4 12 -22			105	154	4 12 -10			214	213	4 15 -6			234	262	5 1 -18			604	590
4 12 -21			134	111	4 12 -9			211	200	4 15 -3			204	292	5 1 -16			204	244
4 12 -20			154	172	4 12 -8			240	246	4 15 0			174	146	5 1 -15			245	249
4 12 -19			246	224	4 12 -7			341	329	4 15 2			239	292	5 1 -14			203	239
4 12 -17			147	117	4 12 -6			424	440	4 15 4			347	352	5 1 -13			546	575
4 12 -16			223	222	4 12 -5			310	321	4 15 5			212	251	5 1 -12			263	290
4 12 -12			244	267	4 12 -4			413	421	4 15 7			265	289	5 1 -11			534	502
4 12 -11			245	247	4 12 -2			101	173	4 15 10			132	142	5 1 -10			426	429
4 12 -10			328	319	4 12 -1			521	520	4 16 -15			99	100	5 1 -9			295	266
4 12 -8			319	369	4 12 1			505	502	4 16 -4			244	251	5 1 -8			319	304
4 12 -6			244	273	4 12 3			385	377	4 16 -1			361	365	5 1 -7			145	175
4 12 -5			325	349	4 12 5			273	277	4 16 -8			140	157	5 1 -6			507	409
4 12 -2			194	174	4 12 12			140	215	4 17 -6			317	336	5 1 -5			366	413
4 12 -1			242	309	4 12 -14			304	291	4 17 -3			240	245	5 1 -4			651	641
4 12 0			144	147	4 12 -12			314	321	4 17 4			152	191	5 1 -3			379	393
4 12 1			221	193	4 12 -10			264	250	4 17 6			222	224	5 1 -2			907	915
4 12 2			462	454	4 12 -9			374	363	4 17 9			117	152	5 1 1			291	309
4 12 3			191	199	4 12 -8			219	219	4 18 -11			133	141	5 1 2			554	400
4 12 4			561	576	4 12 -7			229	197	4 18 -7			189	223	5 1 3			337	330
4 12 5			214	234	4 12 -6			564	571	4 18 -4			146	173	5 1 4			524	504
4 12 6			256	244	4 12 -1			392	397	4 18 -2			194	182	5 1 7			304	294
4 12 7			243	269	4 12 2			327	337	4 18 -1			133	150	5 1 8			246	242
4 12 8			509	499	4 12 3			203	170	4 18 0			227	256	5 1 10			248	256
4 12 12			377	391	4 12 4			340	371	4 18 5			175	200	5 1 11			349	350
4 12 14			331	344	4 12 5			203	214	4 18 6			126	122	5 1 14			244	242
4 12 16			226	244	4 12 6			209	187	4 18 7			124	160	5 1 16			210	202
4 11 -22			176	134	4 12 7			210	184	4 19 -9			170	173	5 1 18			143	204
4 11 -14			462	479	4 12 10			139	151	4 19 -4			161	196	5 2 -22			277	256
4 11 -12			267	287	4 12 -19			137	140	4 19 -1			116	150	5 2 -16			299	323
4 11 -11			235	245	4 12 -17			144	143	4 19 2			110	116	5 2 -14			272	272
4 11 -8			295	299	4 12 -16			313	314	4 19 4			96	119	5 2 -13			205	197
4 11 -6			151	141	4 12 -14			307	321	5 0 -16			465	519	5 2 -12			401	422
4 11 -3			303	302	4 12 -12			255	243	5 0 -14			345	340	5 2 -11			213	231
4 11 -2			353	470	4 12 -7			263	237	5 0 -12			1145	1210	5 2 -10			956	1019
4 11 -1			319	334	4 12 -6			183	222	5 0 -10			324	347	5 2 -8			673	690
4 11 0			631	644	4 12 -4			249	266	5 0 -4			509	560	5 2 -6			566	666
4 11 1			276	281	4 12 -3			648	676	5 0 -2			973	958	5 2 -4			556	545
4 11 2			266	269	4 12 -2			213	269	5 0 0			253	243	5 2 -3			197	161
4 11 7			119	127	4 12 -1			354	354	5 0 2			397	431	5 2 -2			624	634

TABELA XVIII - (continuação)

DICLORODIFENILS (DIFENILARENIL FOSFINOXID) CORALTO (II)

PAGE 9

M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC		
5	4	1	527	527	5	6	4	484	437	5	9-19	174	145	5	12-18	160	156	5	16-2	243	239
5	4	3	318	327	5	6	5	495	500	5	9-18	519	514	5	12-16	259	257	5	16-8	149	166
5	4	4	254	247	5	6	6	466	461	5	9-17	318	335	5	12-14	352	298	5	17-11	198	179
5	4	5	426	452	5	6	8	334	320	5	9-16	264	262	5	12-12	226	175	5	17-6	141	165
5	4	7	386	415	5	6	9	389	394	5	9-15	305	288	5	12-10	346	327	5	17-3	114	131
5	4	8	282	321	5	6	15	386	331	5	9-11	289	142	5	12-8	599	567	5	17-2	172	202
5	4	9	331	347	5	7-23	223	182	5	9-9	241	235	5	12-1	234	231	5	17-7	169	159	
5	4	10	193	213	5	7-13	354	359	5	9-7	457	440	5	12-0	325	322	5	18-11	249	200	
5	4	12	242	240	5	7-12	240	319	5	9-6	333	395	5	12-2	269	259	5	18-9	129	118	
5	4	17	138	139	5	7-18	229	214	5	9-5	626	663	5	12-7	297	304	5	18-8	173	161	
5	5-15	188	147	5	7-8	223	210	5	9-2	342	145	5	12-8	234	232	5	18-6	170	171		
5	5-14	333	177	5	7-4	264	272	5	9-1	282	265	5	12-9	304	312	5	18-3	174	166		
5	5-16	259	247	5	7-3	355	352	5	9-0	396	410	5	13-18	242	271	5	18-2	100	157		
5	5-17	429	422	5	7-2	816	851	5	9-1	177	197	5	13-16	319	321	5	18-1	112	137		
5	5-11	261	275	5	7-1	322	320	5	9-2	331	346	5	13-12	227	235	5	18-4	232	285		
5	5-7	272	268	5	7-0	586	586	5	9-3	282	272	5	13-11	215	222	5	19-5	193	213		
5	5-14	412	431	5	7-2	443	495	5	9-7	302	315	5	13-6	354	355	5	19-3	282	221		
5	5-7	223	149	5	7-3	341	334	5	9-9	231	220	5	13-2	433	462	5	19-2	92	124		
5	5-4	858	413	5	7-4	215	238	5	9-10	228	270	5	13-1	164	158	6	0-24	110	110		
5	5-3	274	297	5	7-5	242	233	5	9-16	176	176	5	13-0	291	311	6	0-22	573	536		
5	5-2	926	947	5	7-7	422	432	5	10-16	344	353	5	13-9	194	193	6	0-20	320	295		
5	5-1	221	241	5	7-15	162	134	5	10-11	173	191	5	13-10	192	148	6	0-18	315	274		
5	5-1	443	454	5	7-16	189	208	5	10-5	254	243	5	14-19	110	124	6	0-12	576	576		
5	5-1	144	187	5	7-17	244	274	5	10-2	426	475	5	14-13	201	210	6	0-10	364	353		
5	5-2	539	573	5	8-20	270	256	5	10-0	242	228	5	14-11	291	272	6	0-8	373	361		
5	5-4	250	263	5	8-19	385	245	5	10-6	219	182	5	14-10	235	229	6	0-6	693	671		
5	5-5	282	222	5	8-15	193	199	5	10-8	344	346	5	14-8	480	523	6	0-4	346	404		
5	5-6	157	176	5	8-14	419	396	5	10-9	305	365	5	14-7	321	349	6	0-2	299	333		
5	5-7	233	235	5	8-13	350	312	5	10-10	247	319	5	14-6	245	294	6	0-0	295	274		
5	5-9	424	441	5	8-12	256	273	5	10-12	215	219	5	14-2	347	370	6	0-2	537	520		
5	5-13	185	199	5	8-11	447	484	5	10-14	226	234	5	14-4	253	245	6	0-4	640	647		
5	5-14	137	172	5	8-10	596	543	5	11-23	122	148	5	14-5	303	284	6	0-6	332	358		
5	5-16	217	240	5	8-9	522	555	5	11-22	147	153	5	14-7	270	256	6	0-8	443	461		
5	5-18	239	234	5	8-8	440	672	5	11-21	149	143	5	14-8	208	219	6	1-24	223	210		
5	6-13	291	173	5	8-7	241	249	5	11-19	139	131	5	15-18	109	102	6	1-17	335	307		
5	6-15	249	317	5	8-6	357	394	5	11-18	397	378	5	15-10	121	122	6	1-14	657	611		
5	6-12	230	224	5	8-5	566	520	5	11-16	240	257	5	15-3	340	348	6	1-12	482	489		
5	6-10	167	143	5	8-3	330	320	5	11-14	132	94	5	15-2	185	214	6	1-10	508	550		
5	6-9	168	146	5	8-0	217	246	5	11-8	251	230	5	15-1	242	241	6	1-9	494	391		
5	6-8	145	172	5	8-1	262	260	5	11-7	219	216	5	15-0	302	345	6	1-8	819	790		
5	6-7	262	234	5	8-2	294	310	5	11-6	492	515	5	15-1	374	410	6	1-7	589	577		
5	6-6	495	528	5	8-4	335	349	5	11-1	374	402	5	15-2	290	190	6	1-4	170	214		
5	6-5	414	477	5	8-5	217	240	5	11-0	292	297	5	15-3	227	230	6	1-2	475	496		
5	6-4	380	393	5	8-6	603	617	5	11-6	245	248	5	15-9	101	135	6	1-1	187	176		
5	6-2	417	416	5	8-8	417	423	5	11-8	291	239	5	15-10	122	136	6	1-0	175	176		
5	6-2	353	348	5	8-9	313	310	5	12-20	184	158	5	16-16	179	191	6	1-2	190	190		
5	6-3	231	230	5	8-10	174	182	5	12-19	171	175	5	16-3	136	133	6	1-3	274	271		

TABELA XVIII - (continuação)

DICLORO-BIS (DIFENILRENZIL FOSFINOXIDO) CORALTO (II)

PAGE 10

M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC
6	1	4	196	160	6	4-10	234	232	6	7-23	136	100	6	10-20	257	252	6	14	1	324	330			
6	1	6	366	331	6	4-12	113	119	6	7-12	293	265	6	10-10	209	230	6	14	3	197	211			
6	1	8	335	323	6	4-11	195	221	6	7-11	736	743	6	10-12	315	320	6	15-10	164	157				
6	1	10	568	503	6	4-8	412	411	6	7-10	404	454	6	10-8	333	357	6	15-9	177	191				
6	1	12	207	267	6	4-7	210	275	6	7-9	360	340	6	10-3	206	314	6	15-8	307	315				
6	2-22	204	282	6	4-5	445	435	6	7-8	356	396	6	10-2	588	425	6	15-1	224	239					
6	2-19	325	290	6	4-4	194	220	6	7-7	305	324	6	10-1	249	312	6	15-3	133	136					
6	2-10	265	227	6	4-2	728	747	6	7-6	264	253	6	10-0	190	184	6	15-7	94	154					
6	2-16	377	347	6	4-1	577	605	6	7-4	396	415	6	10-7	206	223	6	16-6	110	141					
6	2-15	351	342	6	4-0	571	623	6	7-3	452	446	6	10-12	130	152	6	17-13	191	194					
6	2-14	291	293	6	4-1	207	320	6	7-1	174	170	6	11-10	225	214	6	17-4	202	237					
6	2-13	201	200	6	4-2	556	501	6	7-1	243	275	6	11-12	366	347	6	17-5	170	180					
6	2-10	442	454	6	4-3	347	420	6	7-3	341	332	6	11-11	415	436	6	18-7	115	147					
6	2-9	192	200	6	4-4	273	202	6	7-4	316	310	6	11-10	450	467	6	18-5	169	197					
6	2-7	193	171	6	4-7	432	442	6	7-6	310	321	6	11-9	216	203	6	18-4	95	100					
6	2-6	301	422	6	4-11	142	160	6	7-8	416	452	6	11-8	121	136	6	18-2	154	163					
6	2-5	603	706	6	4-16	113	121	6	7-12	178	200	6	11-2	220	231	6	18-0	146	144					
6	2-4	410	413	6	5-10	255	247	6	7-13	176	170	6	11-0	296	311	7	0-18	305	271					
6	2-3	45	29	6	5-14	305	264	6	8-22	126	140	6	11-11	172	197	7	0-16	241	243					
6	2-2	606	574	6	5-12	248	259	6	8-20	262	224	6	11-12	166	209	7	0-14	271	270					
6	2-0	1006	1019	6	5-11	332	334	6	8-19	242	202	6	12-21	215	195	7	0-10	1127	1116					
6	2	503	591	6	5-10	216	181	6	8-18	318	297	6	12-19	170	171	7	0-8	493	362					
6	2	359	352	6	5-9	248	204	6	8-17	166	155	6	12-18	215	202	7	0-4	493	493					
6	2	235	214	6	5-8	444	403	6	8-13	243	255	6	12-14	244	223	7	0-2	197	219					
6	2	147	154	6	5-7	311	295	6	8-11	331	323	6	12-12	242	276	7	0-0	302	303					
6	2	123	214	6	5-6	195	214	6	8-9	344	354	6	12-4	401	444	7	0-2	142	187					
6	2	191	198	6	5-3	229	256	6	8-7	227	226	6	12-2	396	395	7	0-4	273	241					
6	3-10	251	249	6	5-1	311	335	6	8-4	410	429	6	12-0	223	226	7	0-8	330	345					
6	3-16	304	323	6	5-3	343	367	6	8-3	349	333	6	12-1	222	265	7	0-10	176	157					
6	3-12	351	383	6	5-8	453	498	6	8-2	725	734	6	12-3	174	179	7	1-24	229	225					
6	3-11	230	247	6	5-10	344	360	6	8-1	522	505	6	12-8	117	136	7	1-22	122	125					
6	3-10	527	553	6	5-12	243	320	6	8-0	417	407	6	13-13	156	141	7	1-21	148	132					
6	3-8	833	855	6	6-22	246	265	6	8-2	266	294	6	13-12	162	174	7	1-20	272	261					
6	3-6	391	441	6	6-21	149	142	6	8-10	204	247	6	13-10	310	312	7	1-18	304	393					
6	3-3	345	327	6	6-20	310	269	6	9-21	164	142	6	13-7	138	151	7	1-16	405	402					
6	3-1	270	247	6	6-19	246	270	6	9-20	152	128	6	13-6	255	254	7	1-14	400	380					
6	3	502	627	6	6-15	323	322	6	9-19	167	155	6	13-4	443	477	7	1-12	364	364					
6	3	573	549	6	6-11	123	107	6	9-12	310	320	6	13-0	243	253	7	1-11	457	453					
6	3	207	274	6	6-9	373	395	6	9-11	424	439	6	13-2	187	184	7	1-10	291	269					
6	3	530	533	6	6-8	203	176	6	9-10	381	402	6	13-6	244	297	7	1-9	250	309					
6	3	443	503	6	6-6	125	139	6	9-9	529	530	6	13-7	174	156	7	1-8	362	359					
6	3	174	241	6	6-5	245	231	6	9-4	276	270	6	13-9	157	164	7	1-6	504	510					
6	3	357	381	6	6-3	457	477	6	9-3	262	270	6	14-12	226	224	7	1-4	555	542					
6	3	100	202	6	6-2	628	616	6	9-1	600	616	6	14-8	133	116	7	1-2	480	500					
6	3	196	200	6	6-0	441	402	6	9-7	197	169	6	14-4	315	321	7	1-1	435	453					
6	4-22	350	336	6	6-2	529	546	6	9-8	271	313	6	14-2	471	479	7	1-0	613	587					
6	4-20	267	263	6	6-16	160	193	6	9-12	165	198	6	14-1	372	392	7	1-1	437	459					

TABELA XVIII - (continuação)

DICLORO-BIS (DIFENILRENZIL FOSFINOXID) COBALTO (II)

PAGE 11

M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC	M	K	L	FOBS	FCALC
7	1	2	200	206	7	4	15	161	167	7	8	-9	255	291	7	12	-5	163	155	8	2	-22	153	120
7	2	-24	156	122	7	5	-24	251	238	7	8	-8	311	323	7	12	4	220	240	8	2	-20	328	301
7	2	-20	353	309	7	5	-22	297	269	7	8	-7	352	374	7	12	6	198	206	8	2	-17	230	222
7	2	-17	160	137	7	5	-21	182	179	7	8	-6	237	244	7	12	7	118	120	8	2	-14	238	230
7	2	-14	405	411	7	5	-20	307	290	7	8	-5	101	205	7	13	-19	136	107	8	2	-13	254	232
7	2	-13	204	200	7	5	-18	299	285	7	8	-3	225	221	7	13	-18	118	98	8	2	-11	445	437
7	2	-10	842	875	7	5	-14	311	322	7	8	-1	240	227	7	13	-17	154	129	8	2	-4	514	505
7	2	-9	392	359	7	5	-11	358	342	7	8	6	300	313	7	13	-16	120	133	8	2	-3	375	355
7	2	-8	714	717	7	5	-9	363	436	7	8	8	223	299	7	13	-14	292	265	8	2	-2	674	697
7	2	-7	190	270	7	5	-8	224	267	7	8	9	112	136	7	13	-12	205	149	8	2	-1	220	212
7	2	-2	256	247	7	5	-7	140	149	7	8	10	191	230	7	13	-4	367	342	8	2	0	576	569
7	2	0	317	327	7	5	-4	269	280	7	8	12	165	229	7	13	-2	196	204	8	2	2	249	308
7	2	1	492	485	7	5	-3	264	249	7	9	-22	115	113	7	13	0	165	161	8	2	7	168	160
7	2	4	239	247	7	5	-2	305	310	7	9	-20	157	154	7	13	1	181	195	8	2	8	332	340
7	2	6	545	545	7	5	1	116	130	7	9	-14	218	221	7	13	2	215	244	8	3	-24	134	98
7	2	8	457	492	7	5	4	208	230	7	9	-13	216	187	7	14	-8	153	173	8	3	-16	324	295
7	2	11	246	232	7	6	-10	220	203	7	9	-9	475	480	7	14	-6	291	298	8	3	-12	328	285
7	3	-21	208	186	7	6	-13	455	457	7	9	-7	179	197	7	14	4	252	277	8	3	-10	221	224
7	3	-27	239	232	7	6	-11	215	206	7	9	-4	462	480	7	14	5	121	115	8	3	-4	343	365
7	3	-12	421	423	7	6	-10	457	490	7	9	-3	615	630	7	14	7	259	245	8	3	-1	196	144
7	3	-11	266	218	7	6	-8	227	230	7	9	-1	195	209	7	15	-4	149	196	8	3	6	369	379
7	3	-10	476	495	7	6	-3	370	380	7	9	1	321	324	7	15	-1	180	208	8	3	8	267	321
7	3	-9	231	249	7	6	-1	314	337	7	9	4	176	239	7	16	-14	128	123	8	3	9	143	161
7	3	-7	321	295	7	6	0	243	237	7	9	5	208	218	7	16	-9	192	185	8	3	10	217	219
7	3	-5	117	115	7	6	1	264	290	7	10	-22	229	213	7	17	-7	229	234	8	3	12	142	206
7	3	-4	423	400	7	6	6	284	316	7	10	-10	204	195	7	17	-5	107	139	8	4	-22	250	244
7	3	-2	484	514	7	6	11	225	251	7	10	-13	225	215	7	17	-1	117	163	8	4	-20	270	243
7	3	0	701	729	7	7	-21	243	243	7	10	-12	400	399	8	0	-20	421	365	8	4	-18	131	120
7	3	1	292	265	7	7	-20	293	271	7	10	-10	399	385	8	0	-18	192	200	8	4	-14	235	213
7	3	3	454	448	7	7	-19	153	161	7	10	-7	235	246	8	0	-14	203	208	8	4	-13	206	199
7	3	4	442	475	7	7	-18	294	286	7	10	-6	195	220	8	0	-10	507	543	8	4	-10	391	444
7	3	8	231	246	7	7	-6	234	228	7	10	-2	456	433	8	0	-6	329	323	8	4	-9	273	246
7	3	13	215	253	7	7	-5	396	391	7	10	3	137	119	8	0	-2	258	244	8	4	-4	241	266
7	4	-17	168	145	7	7	-4	284	284	7	11	-22	147	109	8	0	8	220	246	8	4	-3	283	276
7	4	-14	200	213	7	7	-3	370	412	7	11	-21	158	145	8	1	-16	158	144	8	4	-1	301	297
7	4	-10	731	731	7	7	-2	269	292	7	11	-20	200	198	8	1	-15	359	331	8	4	0	372	401
7	4	-8	394	391	7	7	0	457	508	7	11	-19	190	191	8	1	-13	250	220	8	4	1	247	227
7	4	-3	185	187	7	7	2	276	312	7	11	-14	262	266	8	1	-12	914	889	8	4	11	175	175
7	4	0	201	179	7	7	4	353	400	7	11	-13	210	181	8	1	-10	645	598	8	5	-24	105	96
7	4	1	589	402	7	7	5	236	272	7	11	-7	150	139	8	1	-8	279	296	8	5	-21	263	253
7	4	3	180	220	7	7	7	347	396	7	11	-6	302	326	8	1	-7	343	356	8	5	-14	434	429
7	4	5	283	329	7	7	8	127	140	7	11	-4	465	486	8	1	-6	204	190	8	5	-12	757	736
7	4	6	320	349	7	7	11	168	167	7	11	10	127	106	8	1	-5	333	330	8	5	-10	424	410
7	4	7	172	204	7	7	12	214	285	7	12	-16	206	164	8	1	-3	234	206	8	5	-5	313	293
7	4	8	350	400	7	8	-14	190	188	7	12	-13	234	247	8	1	-1	162	174	8	5	-4	300	275
7	4	10	230	260	7	8	-13	306	303	7	12	-8	235	249	8	1	0	412	398	8	5	6	193	232
7	4	12	144	181	7	8	-12	232	231	7	12	-6	356	373	8	1	2	318	346	8	5	9	260	294

TABELA XVIII - (continuação)

DICLORO-DIS (DIFENILPENZIL FOSFINOXIDO) COBALTO (II)

PAGE 12

M	K	L	POSS	FCALC	M	K	L	POSS	FCALC	M	K	L	POSS	FCALC	M	K	L	POSS	FCALC	M	K	L	POSS	FCALC
0	6-23		143	141	0	10 -6		435	435	9	2-20		340	54	9	6 -9		306	285	9	13 -0		210	228
0	6-22		147	141	0	10 -5		405	305	9	2-17		241	104	9	6 -8		263	310	9	14-13		135	131
0	6-20		206	202	0	10 -1		271	299	9	2-13		223	107	9	6 -1		260	251	9	14 -4		145	155
0	6-18		247	217	0	10 -0		241	273	9	2-12		547	523	9	7-19		269	276	10	9-22		210	203
0	6-17		240	211	0	11-15		231	204	9	2 -0		413	399	9	7-18		241	253	10	9-20		143	107
0	6 -3		173	101	0	11-14		214	216	9	2 -7		406	338	9	7-11		276	239	10	9-18		200	207
0	6 -5		220	232	0	11-12		227	219	9	2 -6		305	266	9	7 -3		278	329	10	9 -4		254	233
0	7-15		170	175	0	11 -8		340	360	9	2 -5		367	315	9	7 -2		200	225	10	9 -2		193	195
0	7-14		209	200	0	11 -2		252	325	9	2 -3		176	190	9	7 -1		299	325	10	9 -0		451	467
0	7-12		226	230	0	12-19		104	175	9	2 -4		411	441	9	7 -3		210	214	10	9 -4		214	197
0	7 -9		363	360	0	12-16		211	210	9	2 -6		226	237	9	7 -7		129	146	10	1-14		229	202
0	7 -8		267	297	0	12 -9		100	100	9	2 -8		262	295	9	7 -8		109	139	10	1-11		219	173
0	7 -7		270	242	0	12 -6		204	222	9	2 -10		145	172	9	8-12		179	174	10	1-10		236	227
0	7 -3		205	323	0	12 -0		354	392	9	3-22		107	165	9	8-10		225	213	10	1 -9		151	163
0	7 -6		199	193	0	13-18		135	111	9	3-19		133	153	9	8 -9		267	275	10	1 -8		283	262
0	7 -1		262	291	0	13-13		140	141	9	3-11		142	131	9	8 -2		221	218	10	1 -1		255	237
0	7 -2		170	202	0	13 -4		263	270	9	3-10		164	136	9	8 -6		190	215	10	1 -2		251	270
0	7 -6		232	244	0	13 -6		168	150	9	3 -9		153	155	9	8 -7		140	166	10	1 -7		112	92
0	7 -5		263	315	0	13 -2		195	191	9	3 -8		323	318	9	9-10		214	213	10	2-20		163	144
0	7 -10		104	225	0	13 -2		227	260	9	3 -2		374	363	9	9-17		174	164	10	2-14		133	112
0	8-23		134	137	0	13 -4		132	139	9	3 -3		217	250	9	9-15		203	159	10	2-12		235	225
0	8 -9		309	362	0	14-16		121	118	9	3 -5		207	211	9	9 -2		235	250	10	2-10		140	152
0	8 -5		375	344	0	14-10		116	92	9	4-24		111	83	9	9 -1		245	241	10	2 -9		273	230
0	8 -4		232	204	0	14 -1		204	252	9	4-23		131	134	9	9 -0		240	234	10	2 -8		303	323
0	8 -1		456	531	0	14 -0		200	237	9	4-21		174	122	9	9 -1		227	226	10	2 -1		210	194
0	8 -2		521	420	0	14 -3		150	183	9	4-16		240	224	9	10-20		220	208	10	2 -2		240	255
0	8 -1		246	255	0	15-14		174	167	9	4-12		407	429	9	10-16		207	210	10	3-12		150	165
0	8 -5		109	232	0	15-11		234	204	9	4 -9		337	330	9	10-14		147	132	10	3-11		232	220
0	9-23		126	119	0	15-10		90	91	9	4 -3		166	159	9	10-12		180	176	10	3 -8		237	217
0	9-21		146	177	0	16 -6		177	149	9	4 -4		315	354	9	10-10		294	266	10	3 -3		219	234
0	9-17		240	218	0	16 -3		191	223	9	4 -7		210	219	9	10 -8		206	209	10	3 -3		160	165
0	9-15		194	152	9	2-24		156	152	9	4 -9		174	174	9	10 -6		123	152	10	4-22		124	113
0	9-14		264	219	9	0-18		180	179	9	5-22		230	210	9	11-19		241	231	10	4-20		182	150
0	9-12		201	239	9	0-16		243	195	9	5-19		197	143	9	11-10		249	250	10	4-18		151	127
0	9 -7		246	259	9	0-12		480	432	9	5-18		350	301	9	11-12		134	124	10	4 -7		222	190
0	9 -3		263	262	9	0 -4		395	393	9	5-16		334	263	9	11 -0		227	240	10	4 -6		246	264
0	9 -2		165	276	9	1-22		269	206	9	5-15		287	220	9	11 -5		143	130	10	4 -2		230	234
0	9 -1		146	122	9	1-20		273	233	9	5-10		206	262	9	11 -2		257	292	10	4 -0		245	283
0	9 -1		176	189	9	1-19		254	210	9	5 -9		136	115	9	11 -0		195	229	10	4 -3		174	130
0	9 -5		137	152	9	1 -8		170	176	9	5 -8		234	182	9	12-13		230	232	10	5-15		165	146
0	9 -6		110	134	9	1 -6		204	292	9	5 -6		272	266	9	12-11		245	232	10	5-14		204	173
0	9 -8		101	243	9	1 -4		405	387	9	5 -2		236	253	9	12 -4		234	243	10	5-12		279	271
0	9 -9		139	149	9	1 -2		391	424	9	5 -2		217	238	9	12 -3		263	274	10	5-10		305	309
0	9 -10		176	235	9	1 -0		194	235	9	5 -6		137	122	9	12 -2		197	225	10	5 -1		187	170
0	10-10		166	160	9	1 -2		429	442	9	6-20		193	221	9	13-16		122	97	10	5 -0		167	172
0	10-16		320	324	9	1 -3		130	130	9	6-12		304	350	9	13-12		137	115	10	5 -1		137	139
0	12-14		119	144	9	1 -4		203	205	9	6-10		219	223	9	13 -2		166	102	10	5 -2		169	186

TABELA XVIII - (continuação)

DICLOPO-BIS (DIFENILRENZIL FOSFINOXIDO) COBALTO (II)

M	K	L	FOBS	PCALC	M	K	L	FOBS	PCALC	M	K	L	FOBS	PCALC
12	5	9	126	124	11	2-17	143	153	12	2-10	162	120		
12	6-22	118	124	124	11	2-16	163	175	12	2-7	151	125		
12	6-20	176	166	166	11	2-18	262	250	12	3-6	120	156		
12	6-10	233	207	207	11	2-10	143	250	12	4-15	144	138		
12	6-10	263	247	247	11	2-9	135	121	12	4-6	123	129		
12	6-4	242	317	317	11	2-7	162	143	12	4-5	102	90		
12	6-3	295	249	249	11	2-3	144	176	12	4-4	215	232		
12	6-2	269	278	278	11	2-0	113	106	12	5-13	105	81		
12	6-3	116	130	130	11	3-20	163	164	12	5-12	199	179		
12	6-4	163	172	172	11	3-10	129	129	12	5-10	249	219		
12	7-10	192	179	179	11	3-16	150	111	12	5-9	159	147		
12	7-12	291	245	245	11	3-11	130	117	12	5-8	206	177		
12	7-11	202	199	199	11	3-2	220	240	12	5-6	180	186		
12	7-11	276	267	267	11	4-10	390	373	12	6-14	170	142		
12	7-5	150	157	157	11	4-8	145	144	12	6-12	98	75		
12	8-15	157	115	115	11	4-7	110	127	12	6-6	161	140		
12	8-7	272	264	264	11	5-20	170	159	12	7-11	104	100		
12	8-3	123	152	152	11	5-16	130	110	12	7-10	121	114		
12	8-2	154	145	145	11	5-4	211	203						
12	8-2	196	205	205	11	5-6	190	179						
12	9-20	152	15	15	11	5-4	340	361						
12	9-19	119	80	80	11	5-2	335	351						
12	9-1	124	125	125	11	5-1	120	122						
12	10-10	150	130	130	11	6-14	172	141						
12	10-10	180	151	151	11	6-10	180	162						
12	10-4	202	301	301	11	6-10	272	247						
12	10-3	140	123	123	11	6-7	203	195						
12	10-2	292	209	209	11	6-2	100	64						
12	11-15	136	123	123	11	6-0	170	163						
12	11-13	160	159	159	11	7-13	110	85						
12	11-12	174	107	107	11	7-2	103	101						
12	11-11	169	102	102	11	7-0	107	133						
12	11-10	129	122	122	11	8-14	122	132						
12	11-8	105	174	174	11	9-13	160	162						
12	11-7	146	101	101	11	9-7	152	136						
12	12-7	190	190	190	11	9-4	179	175						
12	12-2	153	170	170	11	10-8	163	163						
11	0-12	150	125	125	11	17-6	160	136						
11	0-10	435	415	415	12	0-14	101	172						
11	0-0	100	107	107	12	0-4	317	322						
11	0-0	100	101	101	12	1-16	97	86						
11	0-0	200	173	173	12	1-14	140	166						
11	1-20	200	190	190	12	1-12	205	270						
11	1-20	200	180	180	12	1-7	162	136						
11	1-20	200	172	172	12	1-6	122	130						
11	1-20	190	190	190	12	1-4	100	85						
11	1-20	300	300	300	12	2-12	157	154						

TABELA XIX - Análise da configuração em torno do ion
Co(II) no $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$

THE EQUATION OF THE PLANE IS OF THE FORM: $A \cdot X + B \cdot Y + C \cdot Z = D = 0$

WHERE A, B, C & D ARE CONSTANTS AND X, Y & Z ARE ORTHOGONALIZED COORDINATES.

PLANE NO.	A	B	C	D	ATOM	X	Y	Z
-----	-	-	-	-	----	-	-	-
1	-0.7061	-0.5889	-0.1879	-3.9033	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	0.6618	4.3113	4.4925
					CL1	2.0521	2.6347	3.9307
					CL2	-0.0551	4.5959	6.5993
2	2.5092	-0.5344	-0.6746	-4.9978	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	0.6618	4.3113	4.4925
					O1	-0.9043	4.1000	3.4175
					O2	1.4788	5.9683	3.7966
3	0.3967	0.5701	-0.7195	-0.5119	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	0.6618	4.3113	4.4925
					CL1	2.0521	2.6347	3.9307
					O1	-0.9043	4.1000	3.4175
4	-0.4923	-0.1194	-0.8622	-4.7138	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	0.6618	4.3113	4.4925
					CL1	2.0521	2.6347	3.9307
					O2	1.4788	5.9683	3.7966
5	-0.0325	0.9009	-0.1447	3.5923	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	0.6618	4.3113	4.4925
					CL2	-0.0551	4.5959	6.5993
					O1	-0.9043	4.1000	3.4175
6	-0.4916	0.2954	-0.3433	-0.8585	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	0.6618	4.3113	4.4925
					CL2	-0.0551	4.5959	6.5993
					O2	1.4788	5.9683	3.7966

DIHEDRAL ANGLES BETWEEN PLANES:

PLANE NO.	PLANE NO.	DIHEDRAL ANGLE
-----	-----	-----
1	2	87.6
1	3	-59.2
1	4	51.7
1	5	-58.0
1	6	53.7
2	3	67.5
2	4	66.8
2	5	-63.4
2	6	-67.6
3	4	69.1
3	5	49.1
3	6	86.5
4	5	88.7
4	6	45.6
5	6	68.2

TABELA XX - Distâncias e ângulos intramoleculares com seus respectivos desvios padrão para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$

At.1	At.2	At.3	d ₁₂	d ₂₃	ângulo	At.1	At.2	At.3	d ₁₂	d ₂₃	ângulo
Cl ₁	Co	Cl ₂	2.249(2)	2.243(2)	121.8(1)	C _{4C}	C _{5C}	C _{6C}	1.427(10)	1.381(10)	121.5(6)
O ₁	Co	O ₂	1.977(3)	1.974(3)	104.0(2)	C _{5C}	C _{6C}	C _{7C}	1.381(10)	1.450(9)	119.9(7)
Cl ₁	Co	O ₁	2.249(2)	1.977(3)	107.4(1)	C _{6C}	C _{7C}	C _{2C}	1.450(9)	1.373(8)	117.4(7)
Cl ₁	Co	O ₂	2.249(2)	1.974(3)	106.4(1)	O ₂	P ₂	C _{1D}	1.501(4)	1.817(6)	112.2(3)
Cl ₂	Co	O ₁	2.243(2)	1.977(3)	104.9(1)	O ₂	P ₂	C _{1E}	1.501(4)	1.793(6)	108.8(3)
Cl ₂	Co	O ₂	2.243(2)	1.974(3)	110.9(1)	O ₂	P ₂	C _{1F}	1.501(4)	1.849(6)	112.4(3)
Co	O ₁	P ₁	1.977(3)	1.513(4)	136.4(2)	C _{1D}	P ₂	C _{1E}	1.817(6)	1.793(6)	106.5(3)
Co	O ₂	P ₂	1.974(3)	1.501(4)	140.8(3)	C _{1D}	P ₂	C _{1F}	1.817(6)	1.849(6)	104.3(3)
O ₁	P ₁	C _{1A}	1.513(4)	1.782(6)	112.1(2)	C _{1E}	P ₂	C _{1F}	1.793(6)	1.849(6)	112.5(3)
O ₁	P ₁	C _{1B}	1.513(4)	1.789(5)	106.8(2)	P ₂	C _{1D}	C _{2D}	1.817(6)	1.423(8)	122.3(5)
O ₁	P ₁	C _{1C}	1.513(4)	1.808(6)	108.7(2)	P ₂	C _{1D}	C _{6D}	1.817(6)	1.425(8)	116.9(5)
C _{1A}	P ₁	C _{1B}	1.782(6)	1.789(5)	108.7(3)	C _{2D}	C _{1D}	C _{6D}	1.423(8)	1.425(8)	120.5(6)
C _{1A}	P ₁	C _{1C}	1.782(6)	1.808(6)	109.9(3)	C _{1D}	C _{2D}	C _{3D}	1.423(8)	1.431(9)	118.2(7)
C _{1B}	P ₁	C _{1C}	1.789(5)	1.808(6)	110.7(3)	C _{2D}	C _{3D}	C _{4D}	1.431(9)	1.402(10)	120.3(7)
P ₁	C _{1A}	C _{2A}	1.782(6)	1.429(8)	118.0(5)	C _{3D}	C _{4D}	C _{5D}	1.402(10)	1.413(10)	120.7(7)
P ₁	C _{1A}	C _{6A}	1.782(6)	1.394(8)	121.2(5)	C _{4D}	C _{5D}	C _{6D}	1.413(10)	1.387(8)	120.1(7)
C _{2A}	C _{1A}	C _{6A}	1.429(8)	1.394(8)	120.6(6)	C _{5D}	C _{6D}	C _{1D}	1.387(8)	1.425(8)	120.2(6)
C _{1A}	C _{2A}	C _{3A}	1.429(8)	1.392(10)	118.5(7)	P ₂	C _{1E}	C _{2E}	1.793(6)	1.393(8)	123.6(5)
C _{2A}	C _{3A}	C _{4A}	1.392(10)	1.396(11)	121.1(8)	P ₂	C _{1E}	C _{6E}	1.793(6)	1.395(8)	115.8(5)
C _{3A}	C _{4A}	C _{5A}	1.396(11)	1.353(11)	120.3(7)	C _{2E}	C _{1E}	C _{6E}	1.393(8)	1.395(8)	120.4(6)
C _{4A}	C _{5A}	C _{6A}	1.353(11)	1.434(9)	121.3(7)	C _{1E}	C _{2E}	C _{3E}	1.393(8)	1.377(8)	120.9(6)
C _{5A}	C _{6A}	C _{1A}	1.434(9)	1.394(8)	118.2(7)	C _{2E}	C _{3E}	C _{4E}	1.377(8)	1.390(9)	120.0(6)
P ₁	C _{1B}	C _{2B}	1.789(5)	1.349(8)	119.3(5)	C _{3E}	C _{4E}	C _{5E}	1.390(9)	1.424(9)	119.3(6)
P ₁	C _{1B}	C _{6B}	1.789(5)	1.429(8)	120.3(4)	C _{4E}	C _{5E}	C _{6E}	1.424(9)	1.396(8)	120.1(6)
C _{2B}	C _{1B}	C _{6B}	1.349(8)	1.429(8)	120.5(5)	C _{5E}	C _{6E}	C _{1E}	1.396(8)	1.395(8)	119.1(6)
C _{1B}	C _{2B}	C _{3B}	1.349(8)	1.421(8)	122.0(6)	P ₂	C _{1F}	C _{2F}	1.849(6)	1.563(9)	109.9(4)
C _{2B}	C _{3B}	C _{4B}	1.421(8)	1.392(9)	118.1(6)	C _{1F}	C _{2F}	C _{3F}	1.563(9)	1.386(8)	115.5(6)
C _{3B}	C _{4B}	C _{5B}	1.392(9)	1.387(9)	119.4(6)	C _{1F}	C _{2F}	C _{7F}	1.563(9)	1.371(9)	122.8(6)
C _{4B}	C _{5B}	C _{6B}	1.387(9)	1.389(8)	123.0(6)	C _{3F}	C _{2F}	C _{7F}	1.386(8)	1.371(9)	121.6(6)
C _{5B}	C _{6B}	C _{1B}	1.389(8)	1.429(8)	116.9(6)	C _{2F}	C _{3F}	C _{4F}	1.386(8)	1.413(10)	118.4(6)
P ₁	C _{1C}	C _{2C}	1.808(6)	1.560(7)	117.4(4)	C _{3F}	C _{4F}	C _{5F}	1.413(10)	1.433(10)	119.5(6)
C _{1C}	C _{2C}	C _{3C}	1.560(7)	1.364(8)	120.4(6)	C _{4F}	C _{5F}	C _{6F}	1.433(10)	1.345(10)	119.7(7)
C _{1C}	C _{2C}	C _{7C}	1.560(7)	1.373(8)	123.1(6)	C _{5F}	C _{6F}	C _{7F}	1.345(10)	1.405(9)	120.9(7)
C _{2C}	C _{3C}	C _{4C}	1.364(8)	1.421(8)	121.2(6)	C _{6F}	C _{7F}	C _{2F}	1.405(9)	1.371(9)	119.8(6)
C _{3C}	C _{4C}	C _{5C}	1.421(8)	1.427(10)	116.7(6)						

TABELA XXI - Equações dos planos dos radicais benzílicos e fenílicos, coordenadas ortogonais absolutas, desvios padrão, distância dos átomos aos planos e ângulos diedros entre os planos no $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{bdfpo}$

THE EQUATION OF THE PLANE IS OF THE FORM: $AX + BY + CZ = D$
WHERE A, B, C & D ARE CONSTANTS AND X, Y & Z ARE ORTHOGONALIZED COORDINATES.

PLANE NO.	A	B	C	D	ATOM	X	Y	Z	DISTANCE	ESD
1	-0.9931	-0.0562	-0.7199	-2.2313	-----ATOMS IN PLANE-----					
					C1A	-0.3937	4.1716	0.7446	-0.002	0.011
					C2A	-0.7667	5.4398	0.2172	0.006	0.010
					C3A	0.0232	6.0423	-0.7359	-0.006	0.015
					C4A	1.1045	5.4181	-1.1966	0.001	0.015
					C5A	1.5527	4.2135	-0.7022	0.002	0.014
					C6A	0.7665	3.5470	0.2959	-0.002	0.012
					-----OTHER ATOMS-----					
					P1	-1.3513	3.4080	2.0031	-0.153	0.003
					O1	-0.9043	4.1900	3.4175	-1.506	0.007
					C10	-3.0770	3.0600	1.0015	0.703	0.011
					C1C	-1.0912	1.7011	2.1753	0.400	0.012
2	0.9316	0.9329	-0.2757	2.4045	-----ATOMS IN PLANE-----					
					C10	-3.0770	3.0600	1.0015	-0.012	0.010
					C20	-3.0152	4.3090	2.0094	0.013	0.013
					C30	-5.2020	4.0433	2.6646	-0.015	0.015
					C40	-5.7023	4.4050	1.4153	0.013	0.014
					C50	-5.0146	3.0226	0.3044	-0.013	0.012
					C60	-3.0592	3.0504	0.5132	0.012	0.012
					-----OTHER ATOMS-----					
					P1	-1.3513	3.4080	2.0031	-0.030	0.003
					O1	-0.9043	4.1900	3.4175	0.250	0.006
					C1A	-0.3937	4.1716	0.7446	1.191	0.012
					C1C	-1.0912	1.7011	2.1753	-1.670	0.011
3	-0.6244	0.7599	-0.1000	1.5000	-----ATOMS IN PLANE-----					
					C1C	-1.0912	1.7011	2.1753	0.001	0.012
					C2C	-1.0926	0.0073	1.1792	0.002	0.011
					C3C	-1.5501	0.7075	-0.1407	-0.004	0.012
					C4C	-2.2707	-0.0357	-1.0050	0.003	0.014
					C5C	-3.3512	-0.0095	-0.5400	-0.002	0.015
					C6C	-3.0402	-0.7569	0.7009	0.002	0.016
					C7C	-2.9279	0.0774	1.7077	-0.002	0.014
					-----OTHER ATOMS-----					
					P1	-1.3513	3.4080	2.0031	1.536	0.003
					O1	-0.9043	4.1900	3.4175	1.532	0.006
					C1A	-0.3937	4.1716	0.7446	1.701	0.012
					C10	-3.0770	3.0600	1.0015	2.050	0.011
4	0.2000	0.3710	-0.0907	-0.0720	-----ATOMS IN PLANE-----					
					C10	0.0209	0.2000	4.1955	-0.003	0.011
					C20	-0.1054	0.0232	4.7051	-0.001	0.012
					C30	-1.3000	10.2320	4.6200	0.000	0.012
					C40	-2.0721	9.5551	4.0443	0.005	0.014
					C50	-2.3014	0.2303	3.5555	-0.010	0.014
					C60	-1.0037	7.0152	3.0070	0.009	0.013
					-----OTHER ATOMS-----					
					P2	1.0292	7.4224	4.1360	0.115	0.003
					O2	1.0700	5.9603	3.7966	-0.150	0.007
					C1E	2.5900	0.2206	2.0503	1.795	0.011
					C1F	2.3000	7.6007	5.0190	-1.120	0.013
5	-0.0370	0.5007	-0.2036	1.0102	-----ATOMS IN PLANE-----					
					C1E	2.5900	0.2206	2.0503	-0.003	0.012
					C2E	3.2591	0.4206	3.0274	0.012	0.013
					C3E	3.9154	10.0335	1.9705	-0.010	0.014
					C4E	3.0520	0.1796	0.7052	0.014	0.015
					C5E	3.1730	0.0493	0.5100	-0.005	0.015
					C6E	2.5312	7.0200	1.5910	0.000	0.014
					-----OTHER ATOMS-----					
					P2	1.0292	7.4224	4.1360	0.135	0.003
					O2	1.0700	5.9603	3.7966	-0.006	0.006
					C10	0.0209	0.2000	4.1955	1.099	0.012
					C1F	2.3000	7.6007	5.0190	-0.600	0.015
6	-0.0593	-0.3003	-0.0201	-0.3770	-----ATOMS IN PLANE-----					
					C1F	2.3000	7.6007	5.0190	-0.004	0.012
					C2F	3.0732	0.0026	5.0035	0.017	0.012
					C3F	3.5337	5.5000	0.0014	0.045	0.014
					C4F	4.7035	4.0514	0.7025	-0.010	0.016
					C5F	5.9000	5.0213	0.0070	-0.042	0.015
					C6F	0.0056	6.0470	5.0513	-0.011	0.014
					C7F	4.9000	7.5037	5.0004	0.044	0.013
					-----OTHER ATOMS-----					
					P2	1.0292	7.4224	4.1360	1.029	0.003
					O2	1.0700	5.9603	3.7966	2.507	0.007
					C10	0.0209	0.2000	4.1955	1.341	0.011
					C1E	2.5900	0.2206	2.0503	2.053	0.011

DIEDRAL ANGLES BETWEEN PLANES:

PLANE NO.	PLANE NO.	DIEDRAL ANGLE
1	2	-69.6
1	3	83.7
1	4	60.5
1	5	69.3
1	6	29.6
2	3	52.1
2	4	49.5
2	5	70.4
2	6	-83.3
3	4	75.9
3	5	19.1
3	6	-87.0
4	5	60.2
4	6	47.0
5	6	07.5

TABELA XXII - Distribuição estatística dos fatores de estrutura normalizados para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ no grupo espacial C2

STATISTICAL DISTRIBUTION OF E'S CALCULATED FROM WILSON PLOT1

QUANTITY	CALCULATED	THEORETICAL (CENTRIC)	THEORETICAL (ACENTRIC)
AVERAGE MAG OF E'S	0.866	0.798	0.886
AVERAGE OF (E)**2	1.004	1.000	1.000
AVERAGE OF ABS(E**2-1)	0.745	0.968	0.736
PERCENTAGE GREATER THAN ONE	39.84	32.00	37.00
PERCENTAGE GREATER THAN TWO	1.46	5.00	1.00
PERCENTAGE GREATER THAN THREE	0.06	0.30	0.01

STATISTICAL DISTRIBUTION OF E'S AFTER RESCALING AVG E**2 TO 1.0

TEMPERATURE FACTOR USED WAS 2.915

SCALE FACTOR USED WAS 1.410

QUANTITY	CALCULATED	THEORETICAL (CENTRIC)	THEORETICAL (ACENTRIC)
AVERAGE MAG OF E'S	0.864	0.798	0.886
AVERAGE OF (E)**2	1.000	1.000	1.000
AVERAGE OF ABS(E**2-1)	0.742	0.968	0.736
PERCENTAGE GREATER THAN ONE	39.68	32.00	37.00
PERCENTAGE GREATER THAN TWO	1.46	5.00	1.00
PERCENTAGE GREATER THAN THREE	0.06	0.30	0.01

TABELA XXIII - Figuras de mérito para os conjuntos de fa-
ses calculados pelo MULTAN para oCoCl₂.2tfpo
no grupo espacial C2

SUMMARY OF FIGURES OF MERIT OUTPUT BY TANGENT FORMULA

	ABS FOM	PSI ZERO	RESID
MAXIMUM VALUE	1.4571	0.0000E 00	43.59
MINIMUM VALUE	0.8744	0.0000E 00	24.64
RELATIVE WEIGHTS (FOR COMBINED FOM)	1.00	1.00	1.00

NUMSET	ABS FOM	PSI ZERO	RESID	COMBINED FOM
1	1.4542	0.0000E 00	24.76	2.9889
2	1.4532	0.0000E 00	24.78	2.9860
3	1.4566	0.0000E 00	24.66	2.9963
4	1.4570	0.0000E 00	24.68	2.9980
5	0.8983	0.0000E 00	48.56	1.2811
6	0.9258	0.0000E 00	38.83	1.3381
7	1.4544	0.0000E 00	34.16	1.9638
8	1.0778	0.0000E 00	37.33	1.6795
9	1.4561	0.0000E 00	24.70	2.9945
10	1.4508	0.0000E 00	24.92	2.9746
11	1.4543	0.0000E 00	24.72	2.9912
12	1.4561	0.0000E 00	24.72	2.9943
13	0.9350	0.0000E 00	39.12	1.3418
14	1.4571	0.0000E 00	24.65	2.9880
15	0.9285	0.0000E 00	38.91	1.3397
16	0.9664	0.0000E 00	40.87	1.3814
17	0.9316	0.0000E 00	38.66	1.3542
18	0.9292	0.0000E 00	38.64	1.3551
19	0.9116	0.0000E 00	39.22	1.2947
20	1.4543	0.0000E 00	24.78	2.9883
21	1.0842	0.0000E 00	37.15	1.7001
22	1.4543	0.0000E 00	24.72	2.9914
23	0.9234	0.0000E 00	39.33	1.3089
24	1.0857	0.0000E 00	37.24	1.6980
25	1.4567	0.0000E 00	24.68	2.9975
26	0.9235	0.0000E 00	39.18	1.3171
27	0.9094	0.0000E 00	40.28	1.2346
28	0.9230	0.0000E 00	38.97	1.3273
29	1.0357	0.0000E 00	38.70	1.5348
30	0.9238	0.0000E 00	39.07	1.3232
31	1.4557	0.0000E 00	24.66	2.9967
32	1.0813	0.0000E 00	37.46	1.6785
33	1.4542	0.0000E 00	24.76	2.9889
34	1.4276	0.0000E 00	26.43	2.8551
35	1.4511	0.0000E 00	24.83	2.9881
36	1.4536	0.0000E 00	24.77	2.9874
37	0.8744	0.0000E 00	43.59	1.0000
38	0.9236	0.0000E 00	39.41	1.3051
39	1.4543	0.0000E 00	24.78	2.9924
40	1.0388	0.0000E 00	38.55	1.5484
41	0.9150	0.0000E 00	39.87	1.2659
42	1.4667	0.0000E 00	38.57	1.9435
43	1.4519	0.0000E 00	24.76	2.9850
44	1.4559	0.0000E 00	24.70	2.9951
45	0.9437	0.0000E 00	39.78	1.2684
46	1.4514	0.0000E 00	24.88	2.9788
47	0.9142	0.0000E 00	39.91	1.2624
48	0.9261	0.0000E 00	40.82	1.1834
49	0.9242	0.0000E 00	39.30	1.3118
50	0.9249	0.0000E 00	38.87	1.3359
51	0.9337	0.0000E 00	38.48	1.3714
52	1.4559	0.0000E 00	24.71	2.9948
53	1.0966	0.0000E 00	36.29	1.7666
54	1.4533	0.0000E 00	24.77	2.9867
55	0.9280	0.0000E 00	39.19	1.3107
56	0.9486	0.0000E 00	38.83	1.3785
57	0.9136	0.0000E 00	39.67	1.2744
58	0.9205	0.0000E 00	39.64	1.2875
59	0.9317	0.0000E 00	38.57	1.3636
60	0.9302	0.0000E 00	38.78	1.3496
61	0.9432	0.0000E 00	38.76	1.2875
62	0.9187	0.0000E 00	39.38	1.2985
63	1.4527	0.0000E 00	24.75	2.9869
64	1.1050	0.0000E 00	37.84	1.7413

TABELA XXIV - Parâmetros posicionais de vibração térmica e seus respectivos desvios padrão ($\times 10^5$) do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ no grupo espacial C2

ATOMS -----	x -----	y -----	z -----	U(1,1) -----	U(2,2) -----	U(3,3) -----	U(1,2) -----	U(1,3) -----	U(2,3) -----
CO1	50222(9)	56000(0)	0(0)	173(3)	563(16)	249(4)	0(0)	211(0)	0(0)
CO2	0(0)	25012(19)	52000(0)	172(3)	576(16)	238(4)	0(0)	209(0)	0(0)
CL1	80562(12)	62939(13)	6228(17)	262(5)	1169(32)	633(10)	-389(20)	440(10)	-152(33)
CL2	4327(12)	37854(32)	43778(14)	492(5)	1067(34)	643(7)	-176(26)	883(8)	211(28)
O1	50104(29)	17165(73)	7812(30)	370(14)	1102(84)	323(15)	22(60)	528(18)	291(68)
O2	92375(26)	12315(71)	42333(37)	171(14)	860(76)	363(22)	-190(64)	148(26)	-190(77)
P1	84555(11)	12774(27)	14114(12)	251(5)	674(23)	280(6)	11(20)	342(7)	21(22)
P2	84481(11)	7721(27)	35433(12)	218(5)	643(23)	243(6)	-25(22)	263(7)	14(23)
C1A	53438(39)	42684(94)	23149(43)	218(18)	727(93)	253(22)	-3(78)	264(24)	-54(85)
C2A	51473(47)	44684(118)	28514(54)	260(23)	1143(126)	354(29)	111(95)	283(36)	12(111)
C3A	55563(56)	52555(139)	35412(56)	334(30)	1724(163)	403(29)	-245(126)	356(41)	-743(122)
C4A	61899(61)	58964(116)	74607(62)	493(37)	1891(113)	349(35)	290(114)	182(54)	-623(103)
C5A	64347(58)	57086(130)	31565(78)	312(30)	852(134)	480(43)	-331(116)	155(54)	-1(146)
C6A	62538(49)	49250(127)	24428(57)	349(25)	965(113)	368(33)	-171(110)	317(41)	-26(125)
C1B	38651(46)	34625(110)	10816(45)	296(23)	959(115)	248(22)	12(96)	293(32)	-137(95)
C2B	33936(48)	23330(114)	9254(54)	350(24)	786(112)	439(30)	-245(98)	438(37)	106(110)
C3B	26450(52)	24946(137)	4518(64)	367(26)	1114(124)	746(39)	-341(120)	684(44)	-744(146)
C4B	23822(52)	37020(156)	6162(60)	267(23)	1992(103)	532(34)	-308(124)	504(37)	-371(151)
C5B	28163(46)	42291(138)	7439(57)	335(22)	1334(132)	603(31)	358(109)	634(34)	96(138)
C6B	35794(45)	47667(179)	13284(55)	273(22)	919(120)	477(31)	-7(91)	411(36)	11(109)
C1C	51288(42)	15102(96)	16316(47)	256(20)	693(96)	369(24)	19(83)	317(30)	-132(90)
C2C	52829(60)	6568(129)	23029(59)	533(36)	1101(137)	392(33)	229(128)	474(48)	232(127)
C3C	53395(71)	-5488(149)	24071(62)	784(48)	1347(165)	409(33)	97(159)	658(54)	478(133)
C4C	53762(81)	-12783(129)	14382(85)	804(56)	666(113)	766(60)	575(142)	610(86)	428(155)
C5C	52784(94)	-6859(143)	11766(82)	1579(73)	959(136)	797(52)	1548(165)	1487(82)	587(157)
C6C	51469(80)	7433(148)	10090(67)	1029(53)	1543(183)	517(36)	729(181)	1010(57)	437(154)
C1D	80658(45)	17649(100)	26724(49)	311(22)	684(102)	347(25)	260(87)	399(33)	147(95)
C2D	45648(46)	24341(117)	25164(52)	366(23)	769(99)	409(27)	-372(99)	458(34)	-334(110)
C3D	42686(56)	32340(133)	18256(56)	627(30)	1153(144)	491(30)	-264(118)	819(38)	241(117)
C4D	75156(60)	33406(115)	13274(40)	778(37)	804(115)	235(24)	566(121)	545(42)	492(98)
C5D	70118(53)	27292(139)	14683(55)	443(27)	1303(154)	414(30)	449(121)	532(39)	490(125)
C6D	72912(48)	19467(126)	21564(54)	342(24)	1279(139)	433(29)	215(101)	517(35)	167(116)
C1E	77671(43)	4438(100)	38992(46)	259(21)	918(114)	231(24)	69(90)	221(32)	-38(97)
C2E	74898(49)	-1777(120)	47990(59)	385(24)	731(127)	649(35)	-122(100)	671(39)	24(122)
C3E	69858(48)	274(150)	43426(59)	409(23)	1348(142)	654(35)	-71(122)	721(37)	375(147)
C4E	67741(45)	12666(130)	44194(53)	304(21)	1416(144)	396(28)	242(104)	456(33)	159(116)
C5E	70397(50)	24949(136)	42324(56)	409(27)	1046(127)	472(32)	344(117)	498(40)	216(133)
C6E	75602(47)	22342(113)	39762(50)	383(23)	841(130)	399(26)	-54(95)	515(32)	12(102)

TABELA XXIV - (continuação)

ATOMS	X	Y	Z	A(1,1)	B(2,2)	B(3,3)	B(1,2)	B(1,3)	B(2,3)
-----	-	-	-	-----	-----	-----	-----	-----	-----
C1F	40844(45)-10049(9A)	33904(45)	292(23)	724(99)	178(22)	13(88)	189(32)	-228(83)	
C2F	79240(57)-1431A(127)	27468(55)	491(32)	1023(134)	388(32)	354(121)	451(45)	217(125)	
C3F	79448(74)-30375(155)	25966(72)	648(49)	1475(183)	461(42)	-291(170)	490(65)	-231(160)	
C4F	85206(73)-37963(132)	31511(72)	815(47)	1021(124)	582(41)	-12(139)	698(61)	-727(119)	
C5F	91466(46)-31442(165)	34241(103)	874(73)	1421(177)	797(84)	1864(198)	277(121)	395(225)	
C6F	42528(66)-17511(132)	39584(68)	522(41)	857(131)	418(41)	187(137)	26(68)	-202(140)	
H1	46879	42167	27501	364871					
H2	53986	53625	39209	475094					
H3	64989	64477	41774	513186					
H4	58977	62002	32666	518136					
H5	62154	48795	21205	427211					
H6	35914	14136	9495	408420					
H7	23031	17213	5091	492648					
H8	18541	38522	4683	448163					
H9	24811	56787	6789	476799					
H10	39088	55575	11651	366362					
H11	51655	13035	27191	512020					
H12	53833	-8375	29113	633005					
H13	54351	-22666	18980	716663					
H14	54387	-11666	8277	883616					
H15	49885	11947	5459	669836					
H16	91137	23801	29004	390233					
H17	86031	36975	10655	561096					
H18	73193	39540	8486	467258					
H19	44768	28150	10746	475245					
H20	69436	15241	22761	384834					
H21	76531	-10801	40666	461395					
H22	67494	-7814	44384	490208					
H23	64205	13720	45784	378172					
H24	68882	33842	42001	442943					
H25	77522	30277	30317	377308					
H26	74603	-11121	22904	468319					
H27	75205	-34908	21812	694641					
H28	85281	-47568	30090	658340					
H29	95757	-57229	42122	831759					
H30	94427	-19031	44406	547239					

THE FORM OF THE ANISOTROPIC THERMAL PARAMETER IS:
 $\text{EXP}[-(B(1,1)+H+H+B(2,2)+K+K+B(3,3)+L+L+B(1,2)+H+K+B(1,3)+H+L+B(2,3)+K+L))]$.

TABELA XXV - Parâmetros posicionais e de vibração térmica e seus respectivos desvios padrão do $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ no grupo espacial $Fdd2$

ATOMS	X	Y	Z	0(1,1)	0(2,2)	0(3,3)	0(1,2)	0(1,3)	0(2,3)
CO	50000(0)	0(0)	50000(0)	127(3)	70(1)	500(12)	14(4)	0(0)	0(0)
CL1	57440(11)	-3115(9)	62922(30)	215(5)	166(3)	1120(27)	110(7)	-309(23)	92(10)
O1	46241(26)	-3050(17)	37250(64)	200(14)	07(6)	900(71)	-02(16)	-110(63)	-145(30)
P1	41507(10)	-7040(6)	32705(25)	150(4)	66(2)	699(21)	-19(6)	-31(20)	-3(12)
C1A	42202(36)	-11622(22)	42669(84)	174(10)	61(7)	771(89)	11(20)	62(77)	-1(46)
C2A	37245(42)	-14271(27)	44365(112)	197(21)	05(9)	1513(142)	59(25)	130(97)	76(67)
C3A	37003(46)	-17603(27)	52444(113)	204(24)	92(9)	1607(154)	22(27)	327(110)	222(70)
C0A	43474(55)	-10400(20)	50045(107)	510(30)	97(9)	1009(110)	115(33)	456(120)	341(50)
C5A	40639(52)	-15040(29)	57330(103)	309(32)	117(11)	1113(119)	110(32)	-400(115)	61(67)
C6A	47903(41)	-12307(25)	49432(116)	279(25)	06(0)	910(97)	7(24)	-223(107)	-120(64)
C10	33236(39)	-5502(22)	34614(87)	222(19)	57(7)	074(96)	-14(21)	70(01)	23(40)
C20	29300(44)	-4565(30)	23223(101)	272(25)	139(11)	709(101)	14(30)	-103(96)	20(65)
C30	23109(30)	-3257(30)	25277(125)	214(21)	170(12)	1291(100)	49(27)	-243(104)	209(00)
C40	20506(41)	-2999(30)	37700(124)	103(21)	112(10)	1075(147)	-17(27)	09(113)	169(73)
C50	24205(40)	-3063(27)	-9270(111)	201(20)	124(9)	1197(109)	-15(25)	250(103)	54(60)
C60	30603(30)	-5161(26)	47552(100)	202(20)	105(9)	996(110)	50(23)	-91(00)	-13(59)
C1C	42000(37)	-1100(25)	10951(05)	190(10)	01(0)	639(09)	40(22)	79(75)	10(51)
C2C	40391(40)	-11575(26)	0600(102)	306(29)	04(9)	1043(114)	-12(29)	-35(110)	-104(59)
C3C	41360(00)	-12062(34)	-5519(122)	491(40)	119(12)	1320(142)	69(39)	-200(142)	-09(77)
C4C	44576(67)	-9199(36)	-12912(129)	623(47)	171(15)	1070(134)	154(45)	292(155)	-139(02)
C5C	47194(76)	-5012(30)	-6705(120)	960(64)	173(14)	1152(130)	-207(51)	004(167)	-244(00)
C6C	46127(50)	-5101(32)	7205(110)	560(36)	116(11)	1194(119)	-109(30)	449(122)	-137(69)
M1A	33036	-13731	39639	364007					
M2A	34026	-19503	53613	475094					
M3A	43972	-20992	64591	513106					
M4A	52079	-10303	61042	510136					
M5A	51052	-10420	40629	407211					
M10	31266	-4753	13606	400420					
M20	20311	-2573	17044	492640					
M30	10040	-02191	30769	440163					
M40	20276	-3522	50426	476799					
M50	33302	-5009	55551	366362					
M1C	30149	-13601	10135	234074					
M2C	39705	-10913	-10200	633005					
M3C	40135	-9720	-22709	716003					
M4C	49251	-3146	-4026	003016					
M5C	47603	-2679	11961	009034					

THE FCP= ON THE ANISOTROPIC THERMAL PARAMETER IS:

$$\exp[-(A(1,1)+A(2,2)+A(3,3)+A(1,2)+A(1,3)+A(2,3)+A(1,1))]$$

TABELA XXVI - Distâncias e ângulos intramoleculares
com seus respectivos desvios padrão
para o $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfo}$ no grupo espacial

Fdd2

$\text{At}_1-\text{At}_2-\text{At}_3$	$d_{12} (\text{\AA})$	$d_{23} (\text{\AA})$	ângulo ($^\circ$)
$\text{Cl}_1-\text{Co}-\text{Cl}_1$	2.243(4)	2.243(4)	111.6(3)
$\text{O}_1-\text{Co}-\text{O}_1$	1.940(10)	1.940(10)	100.3(7)
$\text{Cl}_1-\text{Co}-\text{O}_1$	2.243(4)	1.940(10)	109.7(4)
$\text{O}_1-\text{Co}-\text{Cl}_1$	1.940(10)	2.243(4)	112.6(3)
$\text{Co}-\text{O}_1-\text{P}_1$	1.940(10)	1.505(10)	155.2(7)
$\text{O}_1-\text{P}_1-\text{C}_{1A}$	1.505(10)	1.803(15)	111.5(7)
$\text{O}_1-\text{P}_1-\text{C}_{1B}$	1.505(10)	1.798(15)	113.2(6)
$\text{O}_1-\text{P}_1-\text{C}_{1C}$	1.505(10)	1.791(15)	108.5(7)
$\text{C}_{1A}-\text{P}_1-\text{C}_{1B}$	1.803(15)	1.798(15)	105.4(7)
$\text{C}_{1A}-\text{P}_1-\text{C}_{1C}$	1.803(15)	1.791(15)	110.2(7)
$\text{C}_{1B}-\text{P}_1-\text{C}_{1C}$	1.798(15)	1.791(15)	107.9(7)
$\text{P}_1-\text{C}_{1A}-\text{C}_{2A}$	1.803(15)	1.371(21)	122.0(12)
$\text{C}_{2A}-\text{C}_{1A}-\text{C}_{6A}$	1.371(21)	1.377(20)	118.6(14)
$\text{C}_{1A}-\text{C}_{2A}-\text{C}_{3A}$	1.371(21)	1.378(22)	121.6(16)
$\text{C}_{2A}-\text{C}_{3A}-\text{C}_{4A}$	1.378(22)	1.357(26)	119.7(16)
$\text{C}_{3A}-\text{C}_{4A}-\text{C}_{5A}$	1.357(27)	1.387(26)	119.8(15)
$\text{C}_{4A}-\text{C}_{5A}-\text{C}_{6A}$	1.387(26)	1.383(23)	120.0(16)
$\text{C}_{5A}-\text{C}_{6A}-\text{C}_{1A}$	1.383(23)	1.377(20)	120.2(15)
$\text{C}_{6A}-\text{C}_{1A}-\text{P}_1$	1.377(20)	1.803(15)	119.2(11)
$\text{P}_1-\text{C}_{1B}-\text{C}_{2B}$	1.798(15)	1.403(22)	121.5(12)
$\text{C}_{2B}-\text{C}_{1B}-\text{C}_{6B}$	1.403(22)	1.380(22)	118.8(13)
$\text{C}_{1B}-\text{C}_{2B}-\text{C}_{3B}$	1.403(22)	1.386(22)	119.2(17)
$\text{C}_{2B}-\text{C}_{3B}-\text{C}_{4B}$	1.386(22)	1.330(28)	121.5(17)
$\text{C}_{3B}-\text{C}_{4B}-\text{C}_{5B}$	1.330(28)	1.380(26)	121.3(15)
$\text{C}_{4B}-\text{C}_{5B}-\text{C}_{6B}$	1.380(26)	1.404(20)	118.6(17)
$\text{C}_{5B}-\text{C}_{6B}-\text{C}_{1B}$	1.404(20)	1.380(22)	120.5(16)
$\text{C}_{6B}-\text{C}_{1B}-\text{P}_1$	1.380(22)	1.798(15)	119.7(12)
$\text{P}_1-\text{C}_{1C}-\text{C}_{2C}$	1.791(15)	1.397(22)	121.6(13)
$\text{C}_{2C}-\text{C}_{1C}-\text{C}_{6C}$	1.397(22)	1.391(24)	120.6(16)
$\text{C}_{1C}-\text{C}_{2C}-\text{C}_{3C}$	1.397(22)	1.410(26)	118.1(19)
$\text{C}_{2C}-\text{C}_{3C}-\text{C}_{4C}$	1.410(26)	1.362(31)	120.8(22)
$\text{C}_{3C}-\text{C}_{4C}-\text{C}_{5C}$	1.362(31)	1.378(31)	121.6(21)
$\text{C}_{4C}-\text{C}_{5C}-\text{C}_{6C}$	1.378(31)	1.407(26)	118.8(23)
$\text{C}_{5C}-\text{C}_{6C}-\text{C}_{1C}$	1.407(26)	1.391(24)	119.9(20)
$\text{C}_{6C}-\text{C}_{1C}-\text{P}_1$	1.391(24)	1.791(15)	117.6(13)

TABELA XXVII - Análise da configuração em torno do
íon Co(II) no $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$ no grupo
espacial $Fdd2$

THE EQUATION OF THE PLANE IS OF THE FORM $Ax + By + Cz + D = 0$

WHERE A, B, C & D ARE CONSTANTS AND X, Y & Z ARE ORTHOGONALIZED COORDINATES,

PLANE NO.	A	B	C	D	ATOM	X	Y	Z
-----	-	-	-	-	----	-	-	-
1	-0,5537	-0,8327	0,0000	-5,7393	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	10,3651	0,0000	4,0007
					CL1	11,9091	-1,0267	6,1421
					CL2	8,8211	1,0267	6,1421
2	-0,8521	0,5233	0,0000	-0,8326	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	10,3651	0,0000	4,0007
					O1	9,5859	-1,2688	3,6369
					O2	11,1443	1,2688	3,6369
3	0,7026	0,2289	-0,6737	3,9947	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	10,3651	0,0000	4,0007
					CL1	11,9091	-1,0267	6,1421
					O1	9,5859	-1,2688	3,6369
4	0,8805	-0,7225	-0,6866	-2,3168	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	10,3651	0,0000	4,0007
					CL1	11,9091	-1,0267	6,1421
					O2	11,1443	1,2688	3,6369
5	-0,7026	-0,2289	-0,6737	-10,5711	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	10,3651	0,0000	4,0007
					CL2	8,8211	1,0267	6,1421
					O2	11,1443	1,2688	3,6369
6	-0,8805	0,7225	-0,6866	-4,1857	-----ATOMS IN PLANE-----			
					CO	10,3651	0,0000	4,0007
					CL2	8,8211	1,0267	6,1421
					O1	9,5859	-1,2688	3,6369

DIMEDRAL ANGLES BETWEEN PLANES:

PLANE NO.	PLANE NO.	DIMEDRAL ANGLE
-----	-----	-----
1	2	87,9
1	3	54,5
1	4	123,8
1	5	125,4
1	6	56,1
2	3	-61,4
2	4	-63,5
2	5	61,4
2	6	63,5
3	4	69,3
3	5	-84,7
3	6	55,1
4	5	55,1
4	6	-86,7
5	6	69,3

TABELA XXVIII - Equações dos planos dos radicais fenílicos, coordenadas ortogonais absolutas, desvios padrão, distância dos átomos aos planos e ângulos diedros entre os planos no $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{tfpo}$

THE EQUATION OF THE PLANE IS OF THE FORM: $Ax + By + Cz = D = 0$

WHERE A,B,C & D ARE CONSTANTS AND X,Y & Z ARE ORTHOGONALIZED COORDINATES.

PLANE NO.	A	B	C	D	ATOM	X	Y	Z	DISTANCE	ESD
-----	"	"	"	"	----	"	"	"	-----	---
1	0,3140	-0,3101	-0,7953	1,4214	-----ATOMS IN PLANE-----					
					C1A	8,7652	-3,8294	4,1651	0,009	0,000
					C2A	7,7210	-4,7023	4,3307	0,001	0,010
					C3A	7,0367	-5,0262	5,1193	-0,007	0,010
					C4A	9,0123	-6,0914	5,7441	0,003	0,010
					C5A	10,0030	-5,2216	5,5962	0,007	0,010
					C6A	9,9470	-4,0014	4,0253	-0,013	0,010
					-----OTHER ATOMS-----					
					C1B	6,8899	-1,0131	3,3708	-1,000	0,000
					C1C	8,0908	-2,6692	1,4594	1,599	0,000
					P1	8,6044	-2,3190	3,1924	-0,050	0,002
					O1	9,5059	-1,2600	3,6369	-0,639	0,006
2	-0,3087	-0,9499	-0,0403	-0,5672	-----ATOMS IN PLANE-----					
					C1B	6,8899	-1,0131	3,3708	-0,001	0,007
					C2B	6,0923	-1,5045	2,2669	0,006	0,010
					C3B	4,7904	-1,0735	2,4674	-0,011	0,010
					C4B	4,2676	-0,9004	3,6879	0,011	0,010
					C5B	5,0177	-1,2731	4,0102	-0,005	0,009
					C6B	6,3441	-1,7000	4,6417	0,000	0,009
					-----OTHER ATOMS-----					
					C1A	8,7652	-3,8294	4,1651	1,290	0,007
					C1C	8,0908	-2,6692	1,4594	0,287	0,000
					P1	8,6044	-2,3190	3,1924	-0,040	0,002
					O1	9,5059	-1,2600	3,6369	-1,363	0,006
3	-0,0570	0,4022	-0,1816	-9,1660	-----ATOMS IN PLANE-----					
					C1C	8,0908	-2,6692	1,4594	-0,006	0,000
					C2C	8,3731	-3,0130	0,0476	-0,003	0,010
					C3C	8,5740	-3,9744	-0,5300	-0,001	0,012
					C4C	9,2406	-3,0311	-1,2605	0,014	0,013
					C5C	9,7035	-1,9153	-0,6624	-0,022	0,015
					C6C	9,5623	-1,7074	0,7111	0,010	0,012
					-----OTHER ATOMS-----					
					C1A	8,7652	-3,8294	4,1651	-0,949	0,000
					C1B	6,8899	-1,0131	3,3708	1,773	0,000
					P1	8,6044	-2,3190	3,1924	0,093	0,002
					O1	9,5059	-1,2600	3,6369	-0,322	0,000

DIMEDRAL ANGLES BETWEEN PLANES:

PLANE NO.	PLANE NO.	DIMEDRAL ANGLE
-----	-----	-----
1	2	64,3
1	3	-68,0
2	3	-79,4

TABELA XXIX - Fatores de estrutura observados e calculados finais
para o $CoCl_2 \cdot 2H_2O$ no grupo espacial Fdd2

CO CL2 .2 TFPO				OBTENHIDA FDD2				PAGE 1				PAGE 1				PAGE 1			
M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC	M	K	L	FORS	FCALC
0	0	0	1875	1871	0	36	0	311	215	1	17	7	932	913	2	6	2	1801	1760
0	0	0	1534	1521	0	36	4	552	370	1	17	9	453	442	2	6	4	1580	1451
0	2	2	1841	1842	0	38	2	446	522	1	19	3	1016	1093	2	6	6	1483	1462
0	2	6	2269	2293	1	1	1	2899	3144	1	19	5	249	276	2	6	8	948	940
0	2	12	541	532	1	1	3	973	743	1	19	7	426	344	2	6	10	1933	1952
0	4	0	632	611	1	1	5	1492	1427	1	21	1	671	663	2	8	2	2537	2500
0	4	4	799	826	1	1	7	1667	1604	1	21	3	1468	1421	2	8	4	1772	1784
0	4	8	1929	1947	1	1	9	526	581	1	21	5	358	279	2	8	6	1173	1204
0	6	0	4651	4763	1	1	11	485	528	1	21	7	581	559	2	8	8	354	355
0	6	6	272	259	1	3	1	3070	3066	1	21	9	608	594	2	8	10	591	583
0	6	10	817	846	1	3	3	1346	1383	1	23	1	344	425	2	10	0	2418	2419
0	6	14	2333	2257	1	3	5	454	595	1	23	3	1256	1254	2	10	2	1644	1645
0	6	18	3124	3171	1	3	7	1355	1418	1	23	5	551	629	2	10	4	2610	2572
0	8	0	1295	1376	1	3	9	691	742	1	23	7	354	314	2	10	6	1379	1474
0	10	0	1553	1406	1	5	1	1171	1431	1	23	9	666	622	2	10	8	1068	1082
0	10	6	634	977	1	5	3	1248	1222	1	25	1	1109	1081	2	10	10	587	601
0	10	10	754	722	1	5	5	842	929	1	25	3	281	368	2	10	12	2366	2305
0	12	0	2973	2983	1	5	7	1172	1147	1	25	5	393	446	2	12	2	359	436
0	12	4	1914	1950	1	5	9	443	322	1	27	1	998	968	2	12	4	962	894
0	12	8	243	359	1	7	1	5513	5500	1	27	3	412	426	2	12	6	1252	1204
0	14	0	1626	1652	1	7	3	2379	2359	1	27	5	391	407	2	12	8	369	338
0	14	6	2069	2743	1	7	5	673	665	1	29	1	842	803	2	14	0	1625	1653
0	14	12	571	473	1	7	7	745	814	1	29	3	314	304	2	14	2	821	811
0	16	0	1184	1134	1	7	9	1179	1196	1	29	5	310	267	2	14	4	2413	2367
0	16	6	2254	2272	1	7	11	298	274	1	29	7	548	497	2	14	6	366	413
0	16	12	322	444	1	9	1	1354	1354	1	31	1	772	744	2	14	8	350	380
0	16	18	2222	2143	1	9	3	2969	2992	1	31	3	364	483	2	16	0	586	590
0	18	0	405	493	1	9	5	971	976	1	31	5	363	370	2	16	2	1842	1793
0	18	6	563	527	1	9	7	518	555	1	31	7	345	299	2	16	4	327	306
0	20	0	364	441	1	9	11	459	362	1	33	1	441	502	2	16	6	714	689
0	20	6	1519	1615	1	11	1	852	830	1	33	3	551	523	2	16	8	372	257
0	20	12	397	455	1	11	3	1515	1592	1	33	5	537	515	2	16	10	581	622
0	22	0	1425	1436	1	11	5	1257	1276	2	4	2	4299	4369	2	18	0	1210	1227
0	22	6	696	652	1	11	7	467	471	2	0	6	1192	1279	2	18	4	1536	1475
0	24	0	1244	1144	1	11	9	416	392	2	0	10	559	548	2	18	6	815	796
0	24	6	1067	999	1	11	11	391	404	2	2	0	2253	2177	2	18	10	497	492
0	24	12	934	896	1	13	1	564	835	2	2	2	3051	3079	2	20	0	842	937
0	26	0	613	667	1	13	3	1267	1223	2	2	4	1093	1045	2	20	2	1034	1073
0	26	6	457	462	1	13	5	1722	1710	2	2	8	823	740	2	20	4	653	622
0	28	0	1545	1573	1	13	7	803	843	2	2	10	348	328	2	22	0	649	626
0	28	6	369	600	1	15	1	1634	1724	2	4	0	2117	2119	2	22	2	290	291
0	28	12	413	334	1	15	3	636	709	2	4	2	1270	1263	2	22	4	492	477
0	30	0	326	332	1	15	5	1529	1559	2	4	4	947	891	2	22	6	247	272
0	30	6	919	937	1	15	7	437	391	2	4	6	1272	1264	2	22	8	838	813
0	32	0	802	825	1	17	1	999	985	2	4	8	959	959	2	24	2	952	987
0	32	6	426	306	1	17	3	1120	1170	2	4	10	577	487	2	24	4	375	412
0	34	0	857	862	1	17	5	1781	1791	2	6	0	592	643	2	24	6	677	698
0	34	6																	

TABELA XXIX - (continuação)

CO CLZ 2 TRFQ										ONTORONHICO F002										PAGE 2									
M	K	L	F008	FCALC	M	K	L	F008	FCALC	M	K	L	F008	FCALC	M	K	L	F008	FCALC	M	K	L	F008	FCALC					
3	11	1	1945	1947	4	0	4	2846	2782	4	18	8	681	593	5	3	7	685	696	5	23	7	688	598					
3	11	3	2768	2714	4	0	8	1501	1491	4	18	10	174	374	5	3	11	610	505	5	23	1	1537	1561					
3	11	5	432	444	4	2	0	4949	4708	4	28	0	1913	1964	5	5	1	2072	2028	5	25	3	668	715					
3	11	7	826	825	4	2	2	2925	2929	4	28	2	375	380	5	5	3	1590	1568	5	25	7	284	251					
3	11	11	596	542	4	2	4	1035	1373	4	24	4	754	711	5	5	5	1571	1579	5	27	1	519	621					
3	13	3	1545	1575	4	2	4	871	921	4	24	6	707	693	5	5	11	531	541	5	27	3	565	589					
3	13	5	794	757	4	2	6	656	727	4	24	8	351	292	5	7	1	3049	3019	5	27	5	375	294					
3	13	7	752	687	4	2	10	614	617	4	22	0	819	931	5	7	3	575	537	5	27	7	388	373					
3	13	9	445	460	4	4	0	4246	4122	4	22	2	599	547	5	7	5	1194	1176	5	29	1	392	391					
3	15	1	531	543	4	4	2	3742	3742	4	22	6	847	822	5	7	7	835	845	5	29	3	813	821					
3	15	3	1557	1374	4	4	4	1506	1591	4	24	0	1651	1614	5	7	9	647	627	5	29	5	332	144					
3	15	5	1167	1194	4	4	6	982	990	4	24	2	1459	1479	5	7	11	319	428	5	29	7	514	436					
3	15	7	959	894	4	4	8	691	512	4	24	4	728	771	5	9	1	989	1015	5	31	1	511	628					
3	15	9	408	415	4	6	0	1711	1792	4	24	6	376	451	5	9	3	1520	1445	5	31	3	612	578					
3	17	1	1617	1635	4	6	2	662	408	4	24	8	589	577	5	9	5	1545	1379	5	33	1	522	478					
3	17	3	1562	1551	4	6	4	1344	1322	4	26	0	232	296	5	9	11	591	551	5	33	5	579	647					
3	17	5	259	312	4	6	6	1587	1365	4	26	2	401	796	5	11	1	1736	1817	5	35	1	254	326					
3	17	7	555	510	4	6	8	586	563	4	26	4	622	590	5	11	3	658	652	5	35	3	294	188					
3	17	9	234	174	4	6	10	474	468	4	26	6	657	716	5	11	5	528	620	6	0	2	2978	2894					
3	19	1	553	577	4	8	0	1118	1254	4	26	8	501	522	5	11	7	868	874	6	0	6	1680	1665					
3	19	3	758	781	4	8	2	1825	1775	4	28	2	526	544	5	11	9	756	766	6	0	10	1109	1091					
3	19	5	791	772	4	8	4	2121	2123	4	28	4	577	550	5	13	1	1337	1351	6	2	0	1137	1222					
3	19	7	571	417	4	8	6	1069	1059	4	28	6	327	281	5	13	3	1165	1194	6	2	2	231	231					
3	21	1	339	476	4	8	8	758	785	4	30	0	358	425	5	13	5	551	504	6	2	4	2143	2225					
3	21	3	843	822	4	8	10	697	781	4	30	2	743	755	5	13	7	581	555	6	2	6	326	385					
3	21	5	641	1021	4	10	2	742	1354	4	30	4	452	434	5	15	1	1361	1351	6	2	8	481	393					
3	21	7	311	314	4	10	4	1111	1114	4	30	6	314	234	5	15	3	1366	1827	6	4	0	2283	2159					
3	23	1	1649	1511	4	10	6	1750	1798	4	32	0	833	795	5	15	5	323	423	6	4	2	2529	2468					
3	23	3	371	395	4	10	8	1567	1533	4	32	2	799	734	5	15	7	773	791	6	4	4	690	411					
3	23	5	354	376	4	10	10	568	503	4	32	4	548	526	5	15	9	872	893	6	4	6	580	844					
3	23	7	362	392	4	12	2	1297	1293	4	32	6	597	630	5	17	1	1247	1268	6	4	10	442	391					
3	25	1	427	559	4	12	4	366	366	4	34	0	449	457	5	17	3	476	458	6	6	0	2968	2922					
3	25	3	921	878	4	12	6	1159	1118	4	34	2	307	214	5	17	5	834	893	6	6	2	668	631					
3	25	5	844	844	4	12	10	561	612	4	34	4	298	258	5	17	7	1052	1070	6	6	4	1177	1237					
3	25	7	613	691	4	14	2	2666	2686	4	36	0	397	328	5	17	9	647	628	6	6	6	692	744					
3	27	1	1232	1242	4	14	4	352	405	4	36	2	424	340	5	19	1	1403	1406	6	8	0	859	803					
3	27	3	511	451	4	14	10	574	558	4	36	4	448	376	5	19	3	874	854	6	8	2	424	426					
3	29	1	655	722	4	14	10	292	221	4	38	0	338	227	5	19	5	597	679	6	8	4	644	637					
3	29	3	276	253	4	16	2	1298	1134	4	38	2	446	362	5	19	7	245	367	6	8	6	2113	2143					
3	29	5	243	343	4	16	4	1326	1324	5	1	1	902	953	5	21	1	1673	1640	6	8	8	501	496					
3	31	1	347	458	4	16	6	1153	1154	5	1	3	2333	2319	5	21	3	402	465	6	8	10	748	740					
3	31	3	632	618	4	16	8	808	794	5	1	5	1225	1183	5	21	5	412	447	6	10	0	287	339					
3	31	5	599	544	4	16	10	446	355	5	1	7	985	928	5	21	7	816	788	6	10	2	764	720					
3	33	1	629	620	4	18	0	1747	1721	5	1	9	589	678	5	21	9	380	432	6	10	4	1734	1718					
3	33	3	726	734	4	18	2	1502	1529	5	3	1	2140	2185	5	23	1	1027	1007	6	10	6	638	673					
3	35	3	287	270	4	18	4	403	379	5	3	3	2283	2148	5	23	3	467	501	6	10	8	971	977					
4	4	0	2313	2264	4	18	6	744	747	5	3	5	1260	1196	5	23	5	1038	1015	6	12	0	927	1061					

TABELA XXIX - (continuação)

CU CLP .2 TFPD										DENTONOMHICO F002										PAGE 3	
M	K	L	F0BS	FCALC	M	K	L	F0BS	FCALC	M	K	L	F0BS	FCALC	M	K	L	F0BS	FCALC		
6	12	2	2712	2475	7	3	1	819	769	7	21	7	222	632	8	12	8	466	445		
6	12	6	516	523	7	3	3	1250	1228	7	23	1	630	661	8	10	10	497	478		
6	12	12	491	519	7	3	9	1223	1194	7	23	3	308	284	8	12	0	2161	2236		
6	14	0	2246	2316	7	3	7	652	624	7	23	5	411	778	8	12	2	1179	1129		
6	14	2	497	467	7	3	4	546	534	7	23	7	572	578	8	12	4	559	527		
6	14	4	1194	1182	7	3	11	579	486	7	25	1	1122	1080	8	12	6	975	960		
6	14	8	1228	1275	7	5	1	2410	1929	7	25	3	452	505	8	12	8	615	670		
6	15	0	946	981	7	5	3	631	657	7	25	5	639	558	8	12	10	340	350		
6	16	2	1627	1452	7	5	5	1292	1353	7	27	3	827	850	8	14	0	345	459		
6	16	4	367	394	7	5	7	541	545	7	27	7	497	417	8	14	2	1557	1544		
6	16	6	997	1232	7	5	11	691	639	7	29	3	932	894	8	14	4	275	228		
6	16	8	342	266	7	7	1	1514	1558	7	29	5	353	367	8	14	10	392	349		
6	18	0	2572	2595	7	7	3	2093	1979	7	29	7	448	414	8	16	0	1196	1210		
6	18	2	578	456	7	7	5	1781	1794	7	31	1	256	275	8	16	2	893	884		
6	18	4	417	427	7	7	7	456	440	7	31	3	697	661	8	16	4	471	453		
6	18	6	593	597	7	9	1	2410	2009	7	33	1	383	356	8	16	6	732	670		
6	18	8	1829	939	7	9	3	1151	1125	7	33	3	390	325	8	16	8	1265	1234		
6	20	2	523	548	7	9	5	336	342	7	33	5	574	452	8	18	0	1600	1693		
6	20	4	347	515	7	9	7	1217	1029	7	35	1	472	479	8	18	2	1132	1187		
6	20	6	1201	1189	7	9	9	339	366	7	37	1	327	312	8	18	4	1179	1174		
6	22	2	2495	2496	7	11	1	795	814	8	4	0	1750	1807	8	18	6	937	927		
6	22	4	440	348	7	11	3	611	618	8	4	4	4192	4123	8	18	8	500	515		
6	22	6	331	417	7	11	5	918	936	8	4	6	347	459	8	20	0	1358	1346		
6	24	2	517	575	7	11	7	1319	1330	8	2	2	1637	1648	8	20	2	686	707		
6	24	4	476	524	7	11	9	674	619	8	2	4	219	269	8	22	2	874	876		
6	24	6	629	644	7	13	1	1556	1641	8	2	6	522	512	8	22	4	972	957		
6	24	8	313	175	7	13	3	1114	1214	8	2	8	776	798	8	22	6	565	512		
6	26	2	515	556	7	13	5	1154	1147	8	2	10	832	830	8	24	0	533	598		
6	26	4	322	295	7	13	7	641	541	8	4	2	806	865	8	24	2	630	699		
6	26	6	392	893	7	13	9	549	388	8	4	4	1678	1685	8	24	4	849	879		
6	26	8	567	571	7	15	1	2438	2207	8	4	6	604	839	8	24	6	304	278		
6	28	2	445	552	7	15	3	743	766	8	4	10	340	406	8	24	8	337	365		
6	28	4	791	429	7	15	5	807	791	8	6	0	2794	2734	8	26	0	241	271		
6	28	6	337	234	7	15	7	459	511	8	6	2	1827	1531	8	26	2	697	659		
6	30	2	385	424	7	15	9	877	872	8	6	4	1608	1572	8	26	4	672	678		
6	32	4	100	673	7	17	1	561	684	8	6	6	1369	1399	8	26	6	658	495		
6	32	6	526	417	7	17	3	746	784	8	6	8	308	354	8	28	0	886	870		
6	34	0	468	473	7	17	5	729	893	8	6	10	395	302	8	28	2	224	273		
6	34	4	622	974	7	17	7	889	929	8	8	0	3100	3070	8	28	4	983	979		
6	36	0	298	299	7	17	9	599	565	8	8	2	167	270	8	28	6	342	502		
6	36	2	536	518	7	19	1	1459	1426	8	8	4	893	946	8	30	0	503	602		
7	1	1	773	772	7	19	3	1053	1053	8	8	6	277	315	8	30	2	596	687		
7	1	3	2330	2396	7	19	5	328	414	8	8	8	769	777	8	30	4	406	592		
7	1	5	986	963	7	19	7	859	539	8	10	0	2149	2156	8	32	0	327	346		
7	1	7	852	419	7	21	1	909	879	8	10	2	801	777	8	32	2	554	491		
7	1	9	822	843	7	21	3	472	425	8	10	4	1145	1136	8	32	4	615	596		
7	1	11	344	275	7	21	5	746	778	8	10	6	1224	1232	8	34	2	364	325		

TABELA XXIX - (continuação)

CO CL2 .2 TAPD ONTO-PRONALICO FDDP

PAGE 4

M	K	L	FOHS	FCALC	M	K	L	FOHS	FCALC	M	K	L	FOHS	FCALC	M	K	L	FOHS	FCALC	M	K	L	FOHS	FCALC
9	21	1	816	884	10	10	4	698	642	11	1	5	1191	1215	11	25	5	490	549	12	10	2	1433	1422
9	21	3	583	575	10	10	6	1029	1030	11	1	7	1044	1106	11	27	5	573	515	12	16	4	316	289
9	21	5	512	527	10	10	8	625	680	11	1	9	271	240	11	29	1	438	421	12	18	6	544	509
9	23	1	1266	1266	10	12	10	537	431	11	3	1	2233	2242	11	29	3	492	446	12	20	0	388	394
9	23	3	323	345	10	12	2	637	660	11	3	3	636	651	11	31	1	493	440	12	20	4	926	949
9	23	7	363	422	10	12	2	1263	1225	11	3	7	533	379	11	31	3	296	217	12	20	8	520	595
9	25	1	354	231	10	12	4	1050	1039	11	3	9	429	396	11	33	3	289	249	12	22	0	411	402
9	25	3	570	541	10	12	6	1106	1130	11	5	1	790	848	12	0	0	2832	2791	12	22	2	853	866
9	25	5	928	929	10	14	0	1742	1745	11	5	3	1699	1763	12	0	4	958	985	12	22	6	344	359
9	25	7	361	415	10	14	2	193	175	11	5	5	1535	1561	12	0	6	392	341	12	24	0	334	335
9	27	1	485	439	10	14	4	610	630	11	5	7	569	579	12	2	0	490	455	12	24	2	597	372
9	27	3	296	321	10	14	6	508	469	11	5	9	394	421	12	2	2	1223	1245	12	24	4	822	853
9	27	5	339	324	10	16	0	449	480	11	7	1	415	510	12	2	4	389	402	12	24	2	624	645
9	29	1	553	552	10	16	2	1045	1067	11	7	3	1044	1069	12	2	6	1876	1902	12	24	4	270	192
9	29	5	468	432	10	16	4	635	659	11	7	7	788	824	12	2	8	433	313	12	26	6	468	418
9	31	3	392	342	10	16	6	1192	1130	11	7	9	937	926	12	2	10	789	739	12	28	0	750	689
9	31	5	372	357	10	16	8	1378	1439	11	9	1	1227	1235	12	4	0	763	732	12	28	4	573	548
9	33	1	354	274	10	18	2	682	712	11	9	3	1275	1261	12	4	4	1812	1847	12	32	0	552	604
9	33	3	572	546	10	18	4	993	1023	11	9	5	797	771	12	4	6	542	495	12	32	2	247	53
9	35	1	352	313	10	18	6	374	469	11	9	7	346	327	12	4	8	954	961	13	1	1	1092	1113
9	35	3	330	332	10	20	0	780	825	11	9	9	548	593	12	6	0	1209	1192	13	1	3	315	380
10	1	2	1265	1270	10	20	2	926	915	11	11	1	735	666	12	6	2	1907	1948	13	1	5	618	581
10	1	6	1234	1262	10	20	4	497	562	11	11	3	1225	1230	12	6	4	543	538	13	1	7	620	564
10	1	10	592	573	10	22	0	253	384	11	11	5	580	615	12	6	6	240	95	13	1	9	528	510
10	2	0	1614	1630	10	22	2	348	426	11	11	7	910	882	12	8	0	920	906	13	3	1	1655	1704
10	2	2	1553	1524	10	22	4	1356	1327	11	13	1	771	805	12	8	2	621	595	13	3	3	941	1013
10	2	4	1212	1194	10	22	6	577	574	11	13	3	679	682	12	8	4	1618	1607	13	3	5	384	366
10	2	6	320	427	10	24	0	417	522	11	13	5	806	801	12	8	6	439	409	13	3	7	824	811
10	2	8	624	593	10	24	2	672	691	11	13	7	574	564	12	8	8	987	973	13	5	1	735	790
10	4	0	1237	1127	10	24	4	446	434	11	15	1	1452	1432	12	10	0	1120	1125	13	5	3	755	755
10	4	2	743	744	10	24	6	246	203	11	15	3	436	472	12	10	2	1299	1301	13	5	5	811	815
10	4	4	1215	1225	10	24	8	736	683	11	15	5	1240	1271	12	10	4	299	253	13	5	7	932	943
10	4	6	841	827	10	24	2	542	565	11	15	7	639	659	12	10	6	235	191	13	5	9	743	695
10	4	8	884	861	10	26	0	394	510	11	17	1	687	622	12	10	8	463	529	13	7	1	447	485
10	4	10	628	494	10	26	6	297	287	11	17	3	846	837	12	12	0	1301	1286	13	7	3	1080	1143
10	6	2	693	624	10	28	0	446	373	11	17	5	895	1015	12	12	2	514	564	13	7	5	476	493
10	6	2	1075	1104	10	28	2	319	330	11	17	7	499	501	12	12	4	755	826	13	7	7	627	566
10	6	4	696	877	10	28	4	349	317	11	19	1	947	1005	12	12	6	333	298	13	7	9	347	479
10	6	6	716	741	10	28	6	545	534	11	19	3	1011	1030	12	14	0	524	507	13	9	1	1373	1359
10	6	8	919	929	10	30	0	540	525	11	21	1	374	389	12	14	2	1253	1226	13	9	3	1017	1008
10	6	8	2432	2480	10	30	2	235	210	11	21	3	1015	1055	12	14	4	1543	1543	13	9	7	567	510
10	6	2	2072	2097	10	30	4	347	377	11	21	7	596	552	12	14	6	365	265	13	9	9	383	505
10	8	4	1517	1517	10	32	2	512	476	11	23	1	524	507	12	16	0	1455	1515	13	11	1	1029	987
10	8	6	276	241	10	32	4	382	330	11	23	3	1179	1179	12	16	4	494	503	13	11	3	1160	1216
10	8	10	625	571	10	34	0	290	271	11	23	5	623	516	12	16	6	280	128	13	11	5	1286	1196
10	10	0	1140	1141	11	1	1	1514	1478	11	25	1	710	696	12	18	0	365	260	13	11	7	639	648
10	10	2	972	960	11	1	3	475	454	11	25	3	715	680	12	18	0	302	292	13	13	1	1153	1123

TABELA XXIX - (continuação)

CO CL2 ,2 TFPD ORTOGNOMICO F002

PAGE 5

M	K	L	F0BS	FCALC	M	K	L	F0BS	FCALC	M	K	L	F0BS	FCALC	M	K	L	F0BS	FCALC	M	K	L	F0BS	FCALC
13	13	3	519	641	14	10	2	904	928	15	5	7	620	638	16	4	6	470	453	17	5	1	476	527
13	13	5	951	959	14	12	4	690	682	15	5	9	401	328	16	4	8	512	471	17	5	3	456	508
13	13	7	358	316	14	10	6	387	414	15	7	1	809	821	16	6	0	719	713	17	5	5	904	902
13	13	1	1756	1239	14	12	8	427	367	15	7	3	664	660	16	6	2	884	866	17	5	7	502	479
13	13	3	719	726	14	12	2	944	850	15	9	1	744	680	16	6	4	1052	1074	17	7	1	1217	1366
13	15	5	944	1212	14	12	2	1058	1068	15	9	3	819	777	16	6	6	740	783	17	7	3	557	582
13	17	1	411	437	14	12	4	1029	1047	15	9	5	643	617	16	6	8	357	333	17	7	5	749	244
13	17	3	541	561	14	12	6	1123	1076	15	9	7	814	706	16	8	0	960	969	17	7	7	441	467
13	17	5	641	614	14	14	0	753	780	15	11	1	597	554	16	8	2	228	167	17	9	1	420	607
13	17	7	744	823	14	14	2	1043	1059	15	11	3	915	955	16	8	4	591	587	17	9	3	830	834
13	19	1	679	673	14	16	0	444	422	15	11	5	784	744	16	8	6	426	463	17	9	5	543	512
13	19	3	389	357	14	16	2	1085	1059	15	11	7	250	182	16	10	0	965	970	17	9	7	315	453
13	19	5	344	325	14	16	4	537	514	15	13	1	639	613	16	10	2	447	474	17	11	1	614	623
13	21	1	377	452	14	16	6	596	597	15	13	3	884	864	16	10	4	1223	1272	17	11	3	549	555
13	21	3	779	797	14	16	8	277	149	15	13	5	700	728	16	10	6	625	636	17	11	5	544	556
13	21	5	539	516	14	18	0	244	118	15	13	7	565	532	16	12	0	742	778	17	13	1	425	449
13	23	1	425	525	14	18	2	806	825	15	15	1	362	303	16	12	2	569	621	17	13	3	967	961
13	23	3	328	232	14	18	4	1251	1212	15	15	3	742	739	16	12	4	487	455	17	13	5	484	523
13	23	5	265	265	14	18	6	363	374	15	15	5	639	635	16	12	6	380	491	17	15	1	549	594
13	25	1	520	471	14	20	0	1069	1074	15	15	7	298	238	16	14	0	398	418	17	15	3	779	757
13	25	3	614	646	14	20	2	739	722	15	17	1	964	953	16	14	2	790	777	17	15	5	409	349
13	25	5	536	432	14	20	4	373	368	15	17	3	551	567	16	14	4	372	375	17	15	7	346	272
13	27	1	334	374	14	22	0	242	249	15	17	5	566	564	16	16	0	274	313	17	17	1	417	471
13	27	3	442	512	14	22	2	694	726	15	19	1	396	397	16	16	2	761	732	17	17	3	552	340
13	31	1	357	314	14	22	4	319	197	15	19	3	750	735	16	16	4	388	334	17	19	5	401	513
13	31	3	947	942	14	22	6	744	745	15	19	5	524	471	16	16	6	624	615	17	19	7	474	478
14	2	1	1112	1116	14	24	0	320	420	15	19	7	595	545	16	18	0	652	647	17	19	9	451	454
14	2	3	1729	1711	14	24	2	319	253	15	21	1	321	446	16	18	2	523	543	17	21	1	814	794
14	2	5	656	654	14	24	4	284	344	15	21	3	608	651	16	18	4	449	402	17	21	3	292	175
14	2	7	257	317	14	24	6	951	915	15	23	1	655	688	16	20	0	881	854	17	21	5	368	423
14	2	9	455	433	14	26	0	567	584	15	23	3	407	335	16	20	2	533	541	17	23	1	406	348
14	2	1	777	736	14	26	2	291	245	15	25	3	448	469	16	22	0	564	594	17	23	3	461	478
14	2	3	543	597	14	26	4	345	315	15	25	5	469	469	16	22	2	334	343	17	25	5	743	721
14	4	1	1156	1224	14	26	6	464	468	15	27	1	652	632	16	24	0	507	527	17	27	1	610	551
14	4	3	991	965	14	26	8	472	349	15	27	3	342	312	16	24	2	548	533	17	27	3	297	271
14	4	5	737	742	15	1	1	1455	1403	15	29	1	315	307	16	26	0	522	545	17	29	1	442	413
14	4	7	547	527	15	1	3	1278	1321	15	29	3	754	741	16	26	2	295	330	17	29	3	1001	991
14	6	1	992	924	15	1	5	712	679	16	0	4	1301	1306	16	28	0	362	414	17	31	1	937	994
14	6	3	991	1252	15	1	7	394	241	16	0	6	441	782	16	28	2	225	122	17	31	3	801	775
14	6	5	674	694	15	3	1	322	402	16	2	0	806	777	17	1	1	289	342	17	31	5	503	505
14	6	7	571	541	15	3	3	643	661	16	2	2	1301	1330	17	1	3	915	909	17	31	7	1237	1200
14	6	9	649	439	15	3	5	1372	1420	16	2	4	393	436	17	1	5	264	300	17	31	9	769	809
14	8	1	1159	1202	15	3	7	741	753	16	2	6	776	787	17	1	7	364	241	17	31	11	350	294
14	8	3	1431	1414	15	3	9	572	590	16	2	8	317	403	17	3	1	672	677	17	31	13	537	637
14	8	5	236	292	15	5	1	1486	1544	16	4	0	911	931	17	3	3	788	715	17	31	15	485	495
14	8	7	462	454	15	5	3	758	808	16	4	2	678	680	17	3	5	381	411	17	31	17	409	392
14	12	0	1143	1172	15	5	5	228	269	16	4	4	761	773	17	3	7	464	424	17	31	19	893	890

TABELA XXIX - (continuação)

CO EL2 .2 1990					ORTONORMICO FIG2									
M	K	L	FONS	FCALC	M	K	L	FONS	FCALC	M	K	L	FONS	FCALC
18	12	0	1022	1027	22	2	0	379	386	22	2	4	442	709
18	12	2	762	415	22	2	2	1035	1022	22	4	0	325	326
18	12	4	577	582	22	2	4	365	327	22	4	2	549	548
18	12	2	1175	1226	22	2	6	531	531	22	4	4	304	345
18	14	0	616	644	22	4	0	696	738	22	6	0	271	250
18	16	2	311	379	22	4	2	434	453	22	6	2	536	423
18	16	2	822	845	22	4	4	828	825	22	6	4	500	620
18	16	4	586	178	22	4	6	452	540	22	8	0	342	243
18	16	6	746	712	22	6	0	276	248	22	8	2	625	710
18	14	4	341	291	22	6	2	517	450	22	10	0	568	511
18	22	0	202	242	22	6	4	644	561	22	10	4	424	347
18	24	2	378	245	22	6	6	653	616	22	12	0	455	447
18	22	2	1215	1233	22	6	8	579	528	22	14	0	949	925
18	22	4	384	340	22	10	0	251	269	23	1	1	530	550
18	24	0	289	298	22	10	2	526	430	23	3	1	669	697
18	24	2	269	259	22	10	4	444	458	23	5	3	689	697
19	1	1	231	239	22	10	6	331	350	23	7	1	493	451
19	1	3	1000	998	22	12	0	601	594	23	7	3	366	857
19	1	5	494	473	22	12	2	231	105	23	9	1	322	352
19	1	7	309	594	22	14	2	792	709	23	9	3	708	684
19	3	1	555	524	22	14	4	537	518	23	11	1	422	374
19	3	3	815	817	22	14	2	869	848	23	13	1	381	420
19	3	5	448	480	22	16	2	557	609	24	0	0	1200	1161
19	5	1	1245	1242	22	16	0	455	807	24	2	2	415	370
19	5	3	300	545	22	16	2	302	177	24	4	0	568	448
19	5	5	406	527	21	1	1	808	334					
19	5	7	510	344	21	1	3	553	489					
19	7	1	610	366	21	3	1	378	297					
19	7	3	865	447	21	3	3	926	912					
19	7	5	364	414	21	3	5	528	574					
19	9	1	608	644	21	5	1	600	624					
19	9	3	278	225	21	5	3	510	590					
19	9	5	562	544	21	5	5	372	364					
19	11	1	428	343	21	7	3	564	487					
19	11	5	622	341	21	7	5	329	276					
19	13	1	629	749	21	9	1	250	259					
19	13	3	826	515	21	9	3	849	485					
19	15	1	572	640	21	11	1	705	774					
19	15	3	801	821	21	11	3	885	529					
19	17	1	481	372	21	13	1	610	586					
19	17	3	243	141	21	13	3	296	145					
19	19	1	739	751	21	15	1	345	371					
19	21	1	627	412	21	17	1	501	542					
19	21	3	388	343	21	17	3	277	376					
19	23	1	582	423	22	0	2	441	612					
20	0	0	405	392	22	2	0	384	373					
20	0	4	1067	1021	22	2	2	531	547					

TABELA XXX- Distâncias e ângulos entre os átomos centrais

	d(Å) Co-Cl	d(Å) O-P	d(Å) Co-O	ângulo(°) Cl-Co-C	ângulo(°) O-Co-O	ângulo(°) Co-O-P
CoCl ₂ .2tfpo	2.243(4)	1.505(10)	1.940(10)	111.55(28)	100.25(67)	155.21(73)
CoCl ₂ .2bdfpo	2.249(2)	1.513(4)	1.974(3)	121.78(7)	100.04(16)	136.43(24)
	2.243(2)	1.501(4)	1.977(3)			140.80(26)
CoCl ₂ .2dbfpo	2.249(2)	1.529(4)	1.974(3)	120.5(1)	103.7(2)	135.2(2)
CoCl ₂ .2tbpo	2.249(3)	1.517(7)	1.937(7)	113.01(14)	101.93(30)	176.0(8)
	2.255(3)	1.505(7)	1.920(4)			153.0(8)

TABELA XXXI- Ângulos Diedros
Centrais

Ângulos(^o)				
Planos	CoCl ₂ .2tfpo	CoCl ₂ .2bdfpo	CoCl ₂ .2dbfpo	CoCl ₂ .2tbpo
1 e 2	87.9	87.6	88.6	89.6
3 e 4	84.7	86.5	89.0	89.4
5 e 6	86.7	88.7	87.7	89.1

<u>planos</u>	
Nº	
1	Cl ₁ -Co-Cl ₂
2	O ₁ -Co-O ₂
3	Cl ₁ -Co-O ₁
4	Cl ₂ -Co-O ₂
5	Cl ₁ -Co-O ₂
6	Cl ₂ -Co-O ₂

BIBLIOGRAFIA

- (1) Massabni, A.C. Complexos de fosfinóxidos com Cobalto(II). Tese de Doutorado, Departamento de Química da Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Araraquara, 1973 - publicado no artigo de Massabni, A.C. and Serra, O.A. Cobalt(II) Complexes with phosphine oxides. J.Coord.Chem. 7, 67, 1977.
- (2) Sheka, Z.A., Ablova, M.A. and Yatsimirskii, K.B. Influence of substituents in phosphine oxides on their complex forming properties. Russ. J.of Inorg.Chem., 14, 1465, 1969.
- (3) De Bolzter, N.W. Ph.D. Thesis, The coordination chemistry of aminophosphine oxide and related compounds, University of Leiden, Holland, 1972.
- (4) Joesten, M.D., Hussain, M.S. and Lenhert, P.G. Structure studies of pyrophosphate chelate rings. I- The crystal structure of tris-octamethylpyrophosphoramide complexes of Cobalt(II), Magnesium(II), and Copper(II) perchlorates. Inorg.Chem., 9:1, 151, 1970.
- (5) Bertrand, J.A., Graham, S.L., Deutsch, H.M. and Van Derveer, D.G. The crystal and molecular structure of dibrom bis(triphenylphosphine oxide) Copper(II). Inorg.Chem. Acta, 19, 189, 1976.
- (6) Stout, G.H. and Jensen, L.H. X-ray structure determination: A practical guide. New York, The MacMillan Company, 1968.
- (7) Buerger, M.J. Crystal structure analysis. New York, John Wiley & Sons, Inc., 1967.
- (8) International tables for X-ray crystallography III, The Kynoch Press- Birmingham, England, 1962.
- (9) Woolfson, M.M. Escola Latino Americana de Cristalografia: Métodos Diretos. Notas de aula. São Carlos, SP, Brasil, 1976.

- (10) Germain, G., Main, P. and Woolfson, M.M. The application of phase relationships to complex structures. III- The optimum use of phase relationships. *Acta Cryst.*, A27, 368, 1971.
- (11) Karle, J. and Hauptmann, H. A theory of phase determination for the four types of non centrosymmetric space groups $1P222$, $2P22$, $3P_12$, $3P_22$. *Acta Cryst.*, 9, 635, 1956.
- (12) Ahmed, F.R. Crystallographic Computing- Munksgaard Copenhagen, 1970.
- (13) Castellano, E.E. Um novo método para obter a função de transmissão em difratometria de raios-X por monocristais. Tese de Livre-Docência, Departamento de Física e Ciências dos Materiais, IFQSC/USP, 1978.
- (14) Santos, R.H. de A. Determinação da estrutura do dicloreto de bis tribenzilfosfinóxido Cobalto(II). Dissertação de Mestrado, Departamento de Química e Física Molecular, IFQSC/USP, 1974- reportada no artigo: Santos, R.H. de A e Mascarenhas, Y.P. The crystal and molecular structure of bis(tribenzylphosphine oxide) Dichloro Cobalt(II). *J. of Coord. Chem.*, in Press.
- (15) Nuffield, E.W. X-Ray Diffraction Methods. New York, John Wiley & Sons, Inc., 1966.
- (16) Buerger, M.J. The precession method. New York, John Wiley & Sons, Inc., 1964.
- (17) Karle, J. and Karle, I. The symbolic addition procedure for phase determination for centrosymmetric and noncentrosymmetric crystals. *Acta Cryst.*, 21, 849, 1966.
- (18) Rollet, J.S. Computing Methods in crystallography. Oxford, Pergamon Press Ltd., 1965.
- (19) Johnson, C.K. Ortep: A fortran thermal ellipsoid plot program for crystal structure illustrations. Oak Ridge National Laboratory, 1965.

- (20) Mascarenhas, Y.P. and Tomita, K. Crystallographic studies of a serie of phenyl and benzylphosphine oxides CoCl_2 complexes. An.Acad.Brasil.Cienc. 47, 228, 1975.
- (21) Cambridge Crystallographic Data Base- Crystallographic Data Centre, University Chemical Laboratory, Cambridge, England, 1978.
- (22) Mangion, M.M., Smith, R. and Shore, S.G. Dichloro bis(triphenylphosphine oxide) Cobalt(II). Cryst.Struct.Comm., 5, 493, 1976.
- (23) Bertrand, J.A. and Kalyanaraman, A.R. The Crystal and molecular structure of dichloro bis(triphenylphosphine oxide) Copper(II) Inorg.Chem.Acta, 5, 3, 1971.
- (24) Cotton, F.A., Barnes, R.D. and Bannister, E. The effect of complex formation by phosphine oxides on their P-O stretching frequencies. J.Chem.Soc., 2199, 1960.
- (25) Roof, R.B., Jr. A theoretical extension of the reduced cell concept in crystallography. Los Alamos Scientific Laboratory of the University of California, 1959.
- (26) Roy, R.M. and Jeffery, J.W. The crystal and molecular structure of bis(N-benzyl diphenylphosphinic amide) dichloro Cobalt(II). Acta Cryst. B29, 1083, 1973.
- (27) Cotton, F.A. and Soderberg, R.H. The Crystal and molecular structure of bis(trimethylphosphine oxide) Cobalt(II) dinitrate. J.Am.Chem.Soc. 85, 2402, 1963.
- (28) Ghilard, C.A. and Bianchi Orlandini, A. Crystal and molecular structure of the five-co-ordinate high spin complex $\{[2-\{[2-(\text{Diethylamino})\text{ethyl}]\text{amino}\}\text{ethyl}]\text{diphenylphosphine oxide}\}$ di-isothiocyanato Cobalt(II). J.C.S.Dalton, 1968, 1972.
- (29) Gusev, A.I., Bokii, N.G., Afonina, N.N., Timofeeva, T.V., Kalinin, A.E. and Struchkov, Yu.T. Crystal structure of the monoclinic form of $(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{PO}$. Zhurnal Strukturnoi Khimii, 14:1, 115, 1973.

- (30) Bandoli, G., Bortolozzo, G., Clemente, D.A., Croatto, V. and Panattoni, C. Crystal and molecular structure of tri-phenylphosphine oxide. J.Chem.Soc.(A), 2778, 1970.
- (31) Gel Fand, I.M. Lectures on Linear Algebra. New York, Wiley , 1961.