



STRUCTURAL SCIENCE
CRYSTAL ENGINEERING
MATERIALS

1

2 **Volume 71 (2015)**

3 **Supporting information for article:**

4 **Comprehensive derivation of bond-valence parameters for ion pairs
5 involving oxygen**

6 **Olivier Charles Gagné and Frank Christopher Hawthorne**

7

8

9 **Table S1** Evaluation of published bond-valence parameters

Be^{2+}	169	a	1.381	0.37	0.080
Mg^{2+}	469	a	1.693	0.37	0.143
		o	1.636	0.42	0.120
Ca^{2+}	1168	a	1.967	0.37	0.183
		o	1.896	0.41	0.171
Sr^{2+}	374	a	2.118	0.37	0.222
Ba^{2+}	856	a	2.285	0.37	0.237
Metalloids					
B^{3+}	1572	a	1.371	0.37	0.069
Si^{4+}	2530	b	1.624	0.37	0.126
		au	1.622	0.37	0.127
		a	1.64	0.37	0.221
Ge^{4+}	350	a	1.748	0.37	0.148
As^{3+}	28	a	1.789	0.37	0.127
As^{5+}	526	a	1.767	0.37	0.108
Sb^{3+}	54	be	1.925	0.455	0.086
		bg	1.927	0.446	0.085
		bd	1.924	0.47	0.093
		an	1.955	0.37	0.13
		bj	1.885	0.53	0.147
Sb^{5+}	183	be	1.904	0.43	0.198
		a	1.942	0.37	0.525
		an	1.912	0.37	0.217
		aw	1.908	0.409	0.209

Te ⁴⁺	212	bd	1.955	0.44	0.120
		a	1.977	0.37	0.198
		bk	1.96	0.41	0.107
Te ⁶⁺	155	a	1.917	0.37	0.229
		bk	1.921	0.56	0.146
Non-metals					
C ⁴⁺	433	e	1.39	0.37	0.093
		au	1.407	0.37	0.211
		o	1.4	0.26	0.716
N ⁵⁺	497	a	1.432	0.37	0.162
		o	1.41	0.43	0.620
P ³⁺	7	e	1.63	0.37	0.216
P ⁵⁺	3691	a	1.617	0.37	0.107
		au	1.615	0.37	0.111
		b	1.604	0.37	0.205
S ⁴⁺	30	a	1.644	0.37	0.136
S ⁶⁺	906	a	1.624	0.37	0.124
Se ⁴⁺	202	a	1.811	0.37	0.147
Se ⁶⁺	191	a	1.788	0.37	0.119
Poor metals					
Al ³⁺	856	e	1.62	0.37	0.211
		o	1.644	0.38	0.121
Ga ³⁺	228	a	1.73	0.37	0.139
In ³⁺	125	a	1.902	0.37	0.200

Sn^{2+}	50	bd	1.849	0.5	0.144
		bh	1.859	0.55	0.135
		b	1.984	0.37	0.139
Sn^{4+}	38	a	1.905	0.37	0.195
Tl^+	74	a	2.124	0.37	0.148
		b	2.172	0.37	0.116
		af	1.927	0.5	0.113
Tl^{3+}	11	b	2.003	0.37	0.294
Pb^{2+}	276	q	1.963	0.49	0.125
		a	2.112	0.37	0.177
Pb^{4+}	12	a	2.042	0.37	0.286
Bi^{3+}	231	a	2.094	0.37	0.190
Bi^{5+}	11	b	2.06	0.37	0.316
Halogens					
Cl^{3+}	6	e	1.71	0.37	0.151
Cl^{5+}	9	e	1.67	0.37	0.089
Cl^{7+}	65	e	1.632	0.37	0.180
Br^{5+}	9	e	1.84	0.37	0.147
Br^{7+}	2	b	1.81	0.37	0.156
I^{5+}	134	bd	1.99	0.44	0.113
		a	2.003	0.37	0.435
I^{7+}	36	b	1.93	0.37	0.327
Transition metals					
Sc^{3+}	88	a	1.849	0.37	0.152

		o	1.877	0.35	0.243
Ti ³⁺	24	b	1.791	0.37	0.183
Ti ⁴⁺	324	a	1.815	0.37	0.164
		o	1.78	0.43	0.139
V ³⁺	70	a	1.743	0.37	0.130
		j	1.749	0.37	0.130
V ⁴⁺	226	a	1.784	0.37	0.149
		j	1.78	0.37	0.121
V ⁵⁺	714	a	1.803	0.37	0.139
		x	1.799	0.37	0.117
Cr ²⁺	17	b	1.73	0.37	0.090
Cr ³⁺	104	a	1.724	0.37	0.129
		w	1.708	0.37	0.136
Cr ⁴⁺	7	e	1.81	0.37	0.242
Cr ⁵⁺	1	w	1.76	0.37	0.205
		e	1.78	0.37	0.061
Cr ⁶⁺	169	a	1.794	0.37	0.157
Mn ²⁺	392	a	1.79	0.37	0.126
		j	1.765	0.37	0.163
		ap	1.762	0.40	0.124
Mn ³⁺	94	a	1.76	0.37	0.152
		j	1.732	0.37	0.188
		ap	1.762	0.35	0.128
Mn ⁴⁺	21	a	1.753	0.37	0.123

		j	1.75	0.37	0.122
		ap	1.762	0.34	0.137
Mn ⁵⁺		ap	1.762	0.30	0.119
Mn ⁶⁺	2	e	1.79	0.37	0.366
		ap	1.762	0.27	0.260
Mn ⁷⁺	7	e	1.827	0.37	0.239
		b	1.79	0.37	0.496
		ap	1.762	0.26	0.265
Fe ²⁺	192	a	1.734	0.37	0.135
		h	1.713	0.37	0.161
		j	1.7	0.37	0.205
Fe ³⁺	466	a	1.759	0.37	0.137
		h	1.751	0.37	0.138
		j	1.765	0.37	0.156
Co ²⁺	304	a	1.692	0.37	0.102
		i	1.685	0.37	0.120
Co ³⁺	15	i	1.637	0.37	0.145
		b	1.7	0.37	0.441
Co ⁴⁺	1	e	1.72	0.37	0.043
Ni ²⁺	255	e	1.675	0.37	0.131
		j	1.67	0.37	0.115
		a	1.654	0.37	0.105
Ni ⁴⁺	5	e	1.78	0.35	0.645
Cu ⁺	57	e	1.61	0.37	0.133

		1	1.504	0.37	0.185
Cu^{2+}	716	a	1.679	0.37	0.095
		j	1.649	0.37	0.172
		l	1.655	0.37	0.152
		bj	1.679	0.36	0.084
Cu^{3+}	11	t	1.735	0.37	0.141
		e	1.739	0.37	0.138
Zn^{2+}	461	a	1.704	0.37	0.101
		o	1.675	0.39	0.085
Y^{3+}	178	a	2.019	0.37	0.161
		b	2.014	0.37	0.157
		bj	2.028	0.35	0.176
Zr^{4+}	117	a	1.928	0.37	0.135
		b	1.937	0.37	0.149
Nb^{4+}	3	e	1.88	0.37	0.173
Nb^{5+}	251	a	1.911	0.37	0.161
		x	1.916	0.37	0.188
Mo^{3+}	5	m	1.834	0.37	0.067
Mo^{4+}	9	j	1.886	0.37	0.449
		m	1.856	0.37	0.114
Mo^{5+}	76	j	1.907	0.37	0.343
		m	1.878	0.37	0.136
Mo^{6+}	970	a	1.907	0.37	0.147
		x	1.915	0.41	0.183

		n	1.87	0.26	0.330
		m	1.9	0.37	0.212
Tc ⁷⁺	6	as	1.909	0.37	0.089
Ru ³⁺	3	o	1.77	0.37	0.033
Ru ⁴⁺	8	b	1.834	0.37	0.124
Ru ⁵⁺	23	o	1.9	0.37	0.219
Rh ³⁺	11	b	1.793	0.37	0.272
Pd ²⁺	29	b	1.792	0.37	0.250
Ag ⁺	200	a	1.842	0.37	0.088
		b	1.805	0.37	0.150
Cd ²⁺	164	a	1.904	0.37	0.122
		ao	1.875	0.37	0.129
Hf ⁴⁺	22	b	1.923	0.37	0.095
Ta ⁵⁺	162	a	1.92	0.37	0.214
W ⁵⁺	4	aj	1.881	0.37	0.199
W ⁶⁺	436	a	1.917	0.37	0.196
		x	1.916	0.41	0.181
		b	1.921	0.37	0.232
		aj	1.906	0.37	0.200
Re ⁵⁺	3	e	1.86	0.37	0.091
Re ⁷⁺	59	e	1.97	0.37	0.923
Os ⁶⁺	1	e	2.03	0.37	2.451
Os ⁸⁺	8	e	1.92	0.37	0.608
Ir ⁴⁺	17	e	1.87	0.37	0.243

Ir^{5+}	6	b	1.916	0.37	0.180
		e	2.01	0.37	1.362
Pt^{2+}	3	b	1.768	0.37	0.130
		e	1.8	0.37	0.318
Pt^{4+}	33	a	1.879	0.37	0.180
Au^{3+}	24	e	1.89	0.37	0.097
		b	1.833	0.37	0.446
Hg^{2+}	52	a	1.972	0.37	0.198
		b	1.93	0.37	0.139
		bj	1.924	0.38	0.129
Lanthanides					
La^{3+}	182	a	2.172	0.37	0.162
		ac	2.172	0.33	0.331
		ae	2.148	0.37	0.203
		bj	2.086	0.45	0.161
Ce^{3+}	76	b	2.151	0.37	0.208
		ab	2.121	0.37	0.162
		ae	2.116	0.37	0.186
Ce^{4+}	28	b	2.028	0.37	0.564
		ab	2.068	0.37	0.213
		al	2.074	0.37	0.176
Pr^{3+}	99	a	2.138	0.37	0.259
		ae	2.098	0.37	0.185
Nd^{3+}	203	a	2.105	0.37	0.160

		b	2.117	0.37	0.201
		ae	2.086	0.37	0.203
		bj	2.021	0.46	0.178
Sm ³⁺	97	b	2.088	0.37	0.171
		ae	2.063	0.37	0.188
		ai	2.055	0.37	0.232
Eu ²⁺	3	b	2.147	0.37	0.204
		al	2.102	0.37	0.071
Eu ³⁺	49	a	2.074	0.37	0.198
		ae	2.038	0.37	0.196
Gd ³⁺	107	b	2.065	0.37	0.202
		ae	2.031	0.37	0.188
		a	2.032	0.37	0.122
Tb ³⁺	48	b	2.049	0.37	0.214
		ae	2.013	0.37	0.163
		a	2.001	0.37	0.195
Dy ³⁺	70	ae	2.005	0.37	0.174
		a	2.025	0.37	0.188
Ho ³⁺	81	ae	1.992	0.37	0.188
		a	1.988	0.37	0.141
		b	2.01	0.37	0.191
Er ³⁺	102	ae	1.979	0.37	0.177
		b	2	0.37	0.184
		ae	1.968	0.37	0.201

		e	1.93	0.37	0.444
Yb ³⁺	82	a	1.965	0.37	0.169
		b	1.985	0.37	0.237
		ae	1.954	0.37	0.191
Lu ³⁺	53	b	1.971	0.37	0.175
		ae	1.947	0.37	0.227
Actinides					
Th ⁴⁺	27	b	2.167	0.37	0.221
		p	2.18	0.35	0.225
U ⁴⁺	18	b	2.112	0.37	0.166
		p	2.13	0.35	0.188
U ⁵⁺	4	b	2.075	0.37	0.239
		p	2.1	0.35	0.291
U ⁶⁺	585	r	2.051	0.519	0.158
		a	2.075	0.37	0.690
		p	2.08	0.35	0.889
Np ⁵⁺	33	p	2.09	0.35	0.820
Np ⁶⁺	7	p	2.07	0.35	1.209
Np ⁷⁺	2	p	2.06	0.35	0.361
Am ³⁺	1	b	2.11	0.37	0.145
		p	2.13	0.35	0.138
Cm ³⁺	1	b	2.23	0.37	1.500
		p	2.12	0.35	0.161

11 †Reference not directly compatible with our dataset if X-Ray data

12

13 **Table S2** ICSD code for the structures used in the derivation of the bond-length to bond-valence
14 equations

ICSD code	R-factor	No. of Al-coordination polyhedra
1975	0.020	2
20495	0.027	1
29443	0.017	1
30521	0.015	1
30538	0.015	1
32744	0.024	1
39337	0.016	2
50618	0.011	1
60845	0.019	1
62615	0.013	2
62616	0.019	2
63185	0.024	1
64962	0.028	1
65004	0.029	1
65665	0.019	1
65666	0.016	1
68913	0.020	1

69958	0.023	1
71893	0.013	1
71894	0.011	1
71895	0.013	1
72416	0.011	2
73249	0.026	2
74860	0.029	1
74968	0.022	1
75366	0.014	1
80672	0.013	1
81358	0.017	1
83449	0.020	1
83450	0.016	4
83458	0.020	1
86785	0.024	1
92629	0.002	1
92708	0.026	2
94590	0.023	3
95408	0.027	12
96685	0.029	1
100278	0.028	1
100368	0.018	1
156658	0.023	2
156729	0.016	3

156730	0.017	3
156731	0.021	3
156732	0.021	3
156733	0.016	3
156734	0.014	3
156735	0.017	3
240475	0.015	1
280310	0.020	1
280607	0.022	2
300020	0.021	1

15

16

17 **Table S3** RMSD values (v.u.) for six two-parameter equations for the 90 multiple-coordination-
18 number ions

Ion	No. of coordination polyhedra	No. of					
		eq.[2]	eq.[3]	eq.[4]	eq.[14]	eq.[15]	eq.[19]
H ⁺	224	0.042	0.036	0.039	0.032	0.039	0.031
Li ⁺	690	0.079	0.078	0.079	0.077	0.079	0.078
Be ²⁺	169	0.095	0.093	0.094	0.091	0.095	0.091
B ³⁺	1572	0.068	0.069	0.068	0.069	0.069	0.069
N ⁵⁺	497	0.110	0.116	0.113	0.118	0.110	0.126
Na ⁺	1683	0.142	0.143	0.142	0.144	0.142	0.143
Mg ²⁺	469	0.115	0.112	0.114	0.110	0.114	0.112

Al ³⁺	856	0.113	0.111	0.112	0.109	0.115	0.112
Si ⁴⁺	2530	0.114	0.118	0.116	0.120	0.115	0.120
Cl ³⁺	5	0.046	0.063	0.054	0.082	0.042	0.085
K ⁺	1479	0.167	0.166	0.166	0.165	0.166	0.166
Ca ²⁺	1168	0.167	0.165	0.166	0.162	0.166	0.165
Sc ³⁺	88	0.106	0.107	0.106	0.108	0.106	0.107
Ti ³⁺	24	0.087	0.092	0.089	0.098	0.089	0.094
Ti ⁴⁺	324	0.151	0.146	0.148	0.142	0.148	0.144
V ³⁺	70	0.139	0.128	0.134	0.119	0.145	0.115
V ⁴⁺	226	0.099	0.101	0.100	0.105	0.098	0.099
V ⁵⁺	714	0.096	0.099	0.097	0.103	0.098	0.100
Cr ²⁺	17	0.059	0.059	0.059	0.059	0.060	0.059
Cr ⁴⁺	7	0.164	0.160	0.161	0.156	0.164	0.160
Mn ²⁺	392	0.120	0.118	0.119	0.116	0.120	0.118
Mn ³⁺	94	0.168	0.167	0.167	0.166	0.168	0.167
Mn ⁴⁺	21	0.133	0.128	0.130	0.123	0.137	0.121
Fe ²⁺	192	0.118	0.115	0.117	0.113	0.117	0.115
Fe ³⁺	466	0.150	0.145	0.147	0.140	0.152	0.147
Co ²⁺	304	0.116	0.109	0.113	0.103	0.123	0.115
Ni ²⁺	255	0.116	0.111	0.114	0.106	0.113	0.109
Cu ⁺	57	0.079	0.079	0.079	0.078	0.080	0.079
Cu ²⁺	716	0.084	0.084	0.084	0.084	0.088	0.086
Zn ²⁺	461	0.091	0.088	0.089	0.086	0.095	0.091
Ga ³⁺	228	0.131	0.133	0.132	0.135	0.131	0.133

Ge ⁴⁺	350	0.148	0.148	0.148	0.149	0.148	0.148
As ³⁺	28	0.054	0.057	0.056	0.062	0.092	0.065
As ⁵⁺	526	0.115	0.113	0.114	0.111	0.116	0.113
Se ⁴⁺	202	0.079	0.069	0.071	0.076	0.141	0.080
Br ⁵⁺	9	0.111	0.082	0.097	0.055	0.080	0.060
Rb ⁺	464	0.151	0.150	0.150	0.150	0.150	0.151
Sr ²⁺	377	0.196	0.193	0.194	0.188	0.195	0.194
Y ³⁺	178	0.138	0.139	0.138	0.140	0.117	0.139
Zr ⁴⁺	117	0.102	0.103	0.102	0.105	0.101	0.101
Nb ⁵⁺	251	0.162	0.159	0.160	0.157	0.161	0.159
Mo ⁵⁺	76	0.142	0.143	0.142	0.146	0.134	0.143
Mo ⁶⁺	970	0.129	0.133	0.131	0.142	0.130	0.133
Ag ⁺	200	0.086	0.084	0.085	0.082	0.087	0.086
Cd ²⁺	164	0.091	0.090	0.091	0.088	0.092	0.091
In ³⁺	125	0.114	0.113	0.113	0.111	0.115	0.114
Sn ²⁺	50	0.079	0.072	0.075	0.079	0.101	0.076
Sn ⁴⁺	38	0.166	0.164	0.165	0.161	0.168	0.166
Sb ³⁺	54	0.085	0.084	0.084	0.084	0.084	0.084
Te ⁴⁺	212	0.095	0.097	0.096	0.100	0.105	0.101
I ⁵⁺	134	0.166	0.135	0.150	0.106	0.146	0.110
I ⁷⁺	36	0.242	0.226	0.234	0.213	0.276	0.215
Cs ⁺	544	0.133	0.133	0.133	0.135	0.133	0.133
Ba ²⁺	857	0.227	0.223	0.225	0.216	0.225	0.224
La ³⁺	182	0.159	0.157	0.158	0.156	0.159	0.159

Ce ³⁺	76	0.127	0.128	0.127	0.131	0.128	0.129
Ce ⁴⁺	28	0.121	0.121	0.121	0.122	0.121	0.121
Pr ³⁺	99	0.148	0.142	0.145	0.135	0.152	0.149
Nd ³⁺	203	0.175	0.169	0.172	0.161	0.181	0.178
Sm ³⁺	97	0.151	0.148	0.150	0.145	0.152	0.150
Eu ²⁺	3	0.024	0.024	0.024	0.025	0.024	0.024
Eu ³⁺	49	0.138	0.136	0.137	0.134	0.137	0.136
Gd ³⁺	107	0.136	0.133	0.134	0.130	0.137	0.135
Tb ³⁺	48	0.113	0.113	0.113	0.114	0.115	0.115
Dy ³⁺	70	0.132	0.130	0.131	0.129	0.134	0.132
Ho ³⁺	81	0.136	0.132	0.134	0.128	0.139	0.136
Er ³⁺	102	0.138	0.136	0.137	0.133	0.140	0.138
Tm ³⁺	44	0.142	0.141	0.141	0.140	0.143	0.142
Yb ³⁺	82	0.174	0.173	0.174	0.173	0.176	0.175
Lu ³⁺	53	0.165	0.164	0.165	0.163	0.169	0.167
Hf ⁴⁺	22	0.087	0.086	0.086	0.086	0.087	0.086
Ta ⁵⁺	162	0.193	0.194	0.194	0.196	0.195	0.196
W ⁶⁺	436	0.187	0.186	0.186	0.188	0.187	0.187
Re ⁷⁺	59	0.184	0.187	0.185	0.190	0.184	0.187
Os ⁷⁺	7	0.207	0.199	0.201	0.204	0.216	0.200
Os ⁸⁺	8	0.208	0.221	0.215	0.233	0.204	0.220
Ir ⁴⁺	17	0.143	0.141	0.142	0.139	0.145	0.143
Hg ²⁺	52	0.190	0.161	0.175	0.129	0.221	0.200
Tl ⁺	74	0.109	0.121	0.107	0.098	0.110	0.110

Tl ³⁺	9	0.085	0.083	0.084	0.081	0.087	0.086
Pb ²⁺	276	0.108	0.108	0.108	0.110	0.111	0.110
Pb ⁴⁺	12	0.192	0.188	0.190	0.184	0.195	0.192
Bi ³⁺	231	0.164	0.151	0.157	0.140	0.182	0.170
Bi ⁵⁺	11	0.212	0.208	0.210	0.212	0.213	0.210
Th ⁴⁺	27	0.159	0.160	0.160	0.163	0.159	0.160
U ⁴⁺	18	0.111	0.113	0.112	0.116	0.112	0.115
U ⁵⁺	4	0.016	0.024	0.020	0.035	0.021	0.027
U ⁶⁺	585	0.144	0.148	0.144	0.167	0.146	0.152
Np ⁵⁺	33	0.057	0.059	0.058	0.063	0.058	0.060
Np ⁶⁺	7	0.083	0.081	0.081	0.085	0.082	0.082
	Mean	0.128	0.126	0.126	0.125	0.130	0.127
	Wt. mean	0.129	0.128	0.128	0.128	0.130	0.129

19

20 **Table S4** ICSD code for the structures used in the anion bond-valence sum verification (inclusive
 21 of previous sets)

Ion	ICSD Code
Brown and Altermatt 1985	
H ⁺	202360
Li ⁺	84617
Be ²⁺	54110
B ³⁺	246060
C ⁴⁺	156626

N ⁵⁺	35494
Na ⁺	84709
Mg ²⁺	31332
Al ³⁺	32744
Si ⁴⁺	30521
P ⁵⁺	79756
S ⁴⁺	15554
S ⁶⁺	95407
Cl ⁷⁺	413238
K ⁺	280999
Ca ²⁺	202245
Sc ³⁺	65010
Ti ⁴⁺	40307
V ³⁺	59244
V ⁴⁺	86775
V ⁵⁺	170714
Cr ³⁺	245275
Cr ⁶⁺	98653
Mn ²⁺	202319
Mn ³⁺	39593
Mn ⁴⁺	95653
Fe ²⁺	246811
Fe ³⁺	80140
Co ²⁺	154223

Ni ²⁺	59588
Cu ²⁺	158375
Zn ²⁺	35652
Ga ³⁺	280793
Ge ⁴⁺	67535
As ³⁺	154363
As ⁵⁺	51072
Se ⁴⁺	412998
Se ⁶⁺	280951
Rb ⁺	171137
Sr ²⁺	281299
Y ³⁺	240470
Zr ⁴⁺	89899
Nb ⁵⁺	37243
Mo ⁶⁺	158777
Ag ⁺	90414
Cd ²⁺	87937
In ³⁺	90003
Sn ⁴⁺	151591
Sb ⁵⁺	51392
Te ⁴⁺	78917
Te ⁶⁺	245054
I ⁵⁺	416691
Cs ⁺	280947

Ba^{2+}	76926
La^{3+}	95753
Pr^{3+}	92444
Nd^{3+}	412406
Eu^{3+}	84881
Tb^{3+}	240703
Dy^{3+}	412523
Ho^{3+}	79757
Er^{3+}	79758
Yb^{3+}	280936
Ta^{5+}	280993
W^{6+}	60547
Pt^{4+}	281475
Hg^{2+}	89685
Tl^+	86099
Pb^{2+}	203201
Pb^{4+}	36629
Bi^{3+}	39611
U^{6+}	280839
Brese and O'Keeffe (1991)	
Ti^{3+}	8149
Cr^{2+}	280309
Mn^{7+}	89508
Co^{3+}	36355

Cu ⁺	61677
Se ⁶⁺	280951
Ru ⁴⁺	95715
Rh ³⁺	74726
Pd ²⁺	416619
Sb ³⁺	31996
I ⁷⁺	400552
Ce ³⁺	76608
Ce ⁴⁺	59302
Sm ³⁺	412946
Eu ²⁺	30546
Gd ³⁺	86172
Tm ³⁺	62617
Lu ³⁺	412249
Hf ⁴⁺	250391
Re ⁷⁺	416510
Ir ⁵⁺	404507
Pt ²⁺	35407
Au ³⁺	92488
Tl ³⁺	201793
Bi ⁵⁺	240975
Th ⁴⁺	64745
U ⁴⁺	201342
U ⁵⁺	170896

Best published parameters	
P ³⁺	300205
Cl ³⁺	59935
Cl ⁵⁺	40285
Cr ⁴⁺	71957
Cr ⁵⁺	85055
Mn ⁶⁺	67580
Co ⁴⁺	922
Ni ⁴⁺	175
Cu ³⁺	78595
Br ⁵⁺	47173
Nb ⁴⁺	88879
Mo ³⁺	202450
Mo ⁴⁺	202860
Mo ⁵⁺	75353
Tc ⁷⁺	61
Ru ⁵⁺	96219
W ⁵⁺	203048
Re ⁵⁺	10481
Os ⁸⁺	63
Ir ⁴⁺	67826
Np ⁵⁺	66995
Np ⁶⁺	51501
This work	

Mn ⁵⁺	97525
Rh ⁴⁺	16448
Pd ⁴⁺	72312
Tb ⁴⁺	60768
Os ⁵⁺	170175
Os ⁷⁺	412142

22

23

24