

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	34200
Nom	Química inorgànica III
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	6.0
Curs acadèmic	2016 - 2017

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1108 - Grau de Química	Facultat de Química	3	Segon quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1108 - Grau de Química	8 - Química Inorgànica	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
LLORET PASTOR, FRANCISCO	320 - Química Inorgànica

RESUM

L'assignatura obligatòria *Química inorgànica III*, de sis crèdits, està inclosa en la matèria *Química inorgànica* del mòdul *Química fonamental*, i s'imparteix en el sisè quadrimestre del grau de química. Després de l'estudi de *Química inorgànica I i II*, en les quals s'han adquirit els coneixements bàsics de la matèria i s'han estudiat les propietats dels elements químics i els seus compostos, *Química inorgànica III* se centra en l'estudi de dos grups fonamentals de compostos inorgànics: els compostos de coordinació i organometàl·lics, i els sòlids.

Els compostos de coordinació i organometàl·lics juguen un paper important en la química inorgànica i representen una forma d'enfocar l'estudi d'aquesta matèria que és aplicable a una enorme varietat de sistemes. El seu estudi té caràcter integrador, uneix conceptes i teories amb fets experimentals i comprèn des de l'estructura electrònica i molecular fins a la síntesi i la reactivitat de les substàncies, la termodinàmica i la cinètica, els estudis bàsics i les aplicacions. Per la seua naturalesa, s'estén des de la química teòrica fins a la bioquímica i en la química organometàl·lica es difuminen els límits convencionals entre la química inorgànica i la química orgànica. L'assignatura optativa de 4,5 crèdits *Química de coordinació i organometàl·lica* de la matèria *Química inorgànica aplicada*, completarà aquest estudi.



En l'actualitat, l'àrea de nous materials està desenvolupant-se de forma molt ràpida. Hi ha un marcat interès per la síntesi i les propietats de nous sòlids inorgànics. Els temes que s'inclouen en l'assignatura *Química inorgànica III* permetran a l'alumne iniciar-se en aquest camp, que es complementarà amb l'assignatura obligatòria de sis crèdits *Ciència de materials* en el setè quadrimestre.

L'assignatura *Química inorgànica III* conté un tema de simetria i teoria de grups, eina de gran utilitat en química i necessària per a abordar amb rigor alguns aspectes dels compostos de coordinació dels metalls de transició.

CONEIXEMENTS PREVIS

Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits

Els alumnes haurien d'haver cursat i aprovat les assignatures Química inorgànica I i Química inorgànica II.

COMPETÈNCIES

1108 - Grau de Química

- Desenvolupar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític.
- Demostrar capacitat inductiva i deductiva.
- Demostrar capacitat de gestió i direcció, esperit emprenedor, iniciativa, creativitat, organització, planificació, control, lideratge, presa de decisions i negociació.
- Resoldre problemes de forma efectiva.
- Demostrar capacitat de treball en equip incloent equips de caràcter interdisciplinari i en un context internacional.
- Demostrar habilitat per a transmetre informació, idees, problemes i solucions tant a un públic especialitzat com no especialitzat i utilitzant si escau les tecnologies de la informació.
- Comprometre's amb l'ètica, els valors d'igualtat i la responsabilitat social com a ciutadà i com professional.
- Aprendre de forma autònoma.
- Demostrar capacitat per a adaptar-se a situacions noves.
- Adquirir una sensibilitat permanent per la qualitat i el medi ambient, el desenvolupament sostenible i la prevenció de riscos laborals.



- Demostrar que coneix els aspectes principals de terminologia química, nomenclatura, convenis i unitats.
- Interpretar la variació de les propietats característiques dels elements químics segons la taula periòdica.
- Demostrar que coneix els tipus principals de reacció química i les seues característiques principals associades.
- Demostrar que coneix els principis de termodinàmica i cinètica i les seues aplicacions en química.
- Demostrar que reconeix els elements químics i els seus compostos: obtenció, estructura, reactivitat, propietats i aplicacions.
- Demostrar que coneix els principis, els procediments i les tècniques per a la determinació, la separació, la identificació i la caracterització de compostos químics.
- Relacionar les propietats macroscòpiques i propietats d'àtoms i molècules individuals, incloent-hi macromolècules (naturals i sintètiques), polímers, col·loides i altres materials.
- Demostrar el coneixement i la comprensió dels fets essencials, dels conceptes, dels principis i de les teories relacionades amb les àrees de la química.
- Resoldre problemes qualitius i quantitius segons models desenvolupats prèviament.
- Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.
- Avaluar, interpretar i sintetitzar les dades i la informació Química.
- Relacionar teoria i experimentació.
- Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.
- Comprendre els aspectes qualitius i quantitius dels problemes químics.
- Desenvolupar metodologies sostenibles i respectuoses amb el medi ambient.
- Que els estudiants sàpien aplicar els seus coneixements al seu treball o vocació d'una forma professional i posseïsquen les competències que solen demostrar-se per mitjà de l'elaboració i defensa d'arguments i la resolució de problemes dins de la seua àrea d'estudi.
- Que els estudiants tinguen la capacitat d'arreglar i interpretar dades rellevants (normalment dins de la seua àrea d'estudi) per emetre judicis que incloguen una reflexió sobre temes rellevants d'índole social, científica o ètica.
- Que els estudiants puguin transmetre informació, idees, problemes i solucions a un públic tant especialitzat com no especialitzat.
- Que els estudiants hagen desenvolupat aquelles habilitats d'aprenentatge necessàries per a emprendre estudis posteriors amb un alt grau d'autonomia.
- Expressar-se correctament, tant en forma oral com escrita, en qualsevol de les llengües oficials de la Comunitat Valenciana.
- Posseir habilitats bàsiques en tecnologies de la informació i comunicació i gestionar adequadament la informació obtinguda.



RESULTATS DE L'APRENTATGE

n aquesta assignatura s'abordaran els resultats d'aprenentatge següents que conté el document de grau dins de la matèria *Química inorgànica*:

- 1.- Saber relacionar, diferenciar i reconèixer el comportament dels elements químics i els seus compostos, així com predir les propietats, els tipus d'enllaç, l'estructura i la possible reactivitat de compostos inorgànics no descrits d'acord amb les relacions entre grups i variacions establertes.
- 2.- Assignar i determinar l'estructura dels diferents tipus de compostos inorgànics.
- 3.- Comprendre i utilitzar la informació bibliogràfica i tècnica sobre els compostos inorgànics.
- 4.- Poder explicar de manera comprensible fenòmens i processos relacionats amb la química inorgànica.
- 5.- Demostrar sensibilitat envers els problemes mediambientals.
- 6.- Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.
- 7.- Prendre decisions amb rigor.
- 8.- Resoldre problemes amb rigor.
- 9.- Realitzar eficaçment les tasques assignades com a membre d'un equip i amb perspectiva de gènere.
- 10.- Demostrar habilitats en les relacions interpersonals i amb perspectiva de gènere.
- 11.- Demostrar capacitat d'ús de les tecnologies de la informació i la comunicació.
- 14.- Explicar de manera comprensible fenòmens experimentals amb les teories que els sustenten.
- 16.- Demostrar compromís ètic amb perspectiva de gènere.
- 17.- Demostrar creativitat.
- 18.- Demostrar aprenentatge autònom.

Aquests resultats han de permetre que al final de l'assignatura l'estudiant siga capaç de:

- Saber determinar els elements de simetria de les molècules.
- Classificar les molècules en el seu grup puntual.
- Saber utilitzar les taules de caràcters, fonamentalment les dels grups puntuals Oh, D_{4h} i T_d.
- Aplicar els conceptes de simetria per construir diagrames d'orbitals moleculars.
- Predir l'estabilitat relativa de dos o més compostos de coordinació, així com el seu caràcter làbil o inert.



- Classificar els tipus de reacció química en la qual participe un compost de coordinació o

Organometàl·lic.

Deduir a partir del comportament observat el mecanisme d'una reacció redox en compostos de coordinació.

- Descriure l'enllaç M-ligand en compostos organometàl·lics.

- Tenir la capacitat de resolució de problemes propis de la química de coordinació i organometàl·lica amb els criteris del raonament, l'associació d'idees i les interrelacions dels fonaments descrits

- Saber l'estructura cristal·lina de diferents tipus de sòlids inorgànics i els factors que la determinen.

- Saber analitzar les reaccions que s'inclouen en un cicle catalític.

- Saber elaborar treballs i informes escrits sobre certs temes del programa, amb l'adequada terminologia pròpia de la matèria, així com la correcta exposició oral dels aspectes més rellevants d'aquests.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Simetria Molecular

1.1.- Simetria. Elements i operacions de simetria.

1.2.- Grups puntuals de simetria. Grups puntuals C_{4v} , D_{3h} , D_{4h} *Td i O_h .

1.3.- Determinació del grup puntual de simetria d'una molècula.

1.4.- Taules de caràcters. Espècies de simetria. Simetria dels orbitals atòmics.

2. Compostos de coordinació i organometàlics dels metalls de transició

2.1.- Caràcters generals: estat d'oxidació. Índex i geometria de coordinació. Complexos quadrats, tetraèdrics i octaèdrics. Geometria i simetria de coordinació. Idealització de la simetria de coordinació.

2.2.- Tipus de lligands. Classificació: naturalesa de l'àtom donador, denticitat, naturalesa de l'enllaç metall

-lligand. Lligands en química organometàl·lica.

3. Naturalesa del enllaç i estructura electrònica

3.1.- Teoria de l'orbital molecular. Diagrames d'orbitals moleculars i configuració electrònica dels complexos octaèdrics, tetraèdrics i quadrats. Enllaç sigma i enllaç pi. Complexos despín alt i espín baix. Estats excitats: tipus de transicions electròniques.

3.2.- Model de solapament angular. Diagrames de desdoblament energètic dels orbitals d en complexos de diferents simetries.



4. Estructura molecular

- 4.1.- Factors que determinen l'estructura molecular d'un complex metàl·lic: electrònics i estèrics.
- 4.2.- Predicció de l'índex de coordinació. Regla dels 16 i 18 electrons.
- 4.3.- Predicció de la geometria de coordinació mitjançant el model *VSEPR i el model de solapament angular. Estereoquímica dels complexos organometàl·lics.
- 4.4.- Estudi particular dels diferents índexs i geometries de coordinació.
- 4.5.- Isomeria en els compostos de coordinació.

5. Reaccions dels complexos metàl·lics: Aspectes termodinàmics i cinètics

- 5.1.- Reaccions en química de coordinació.
 - 5.1.1.- Reaccions de substitució de lligand: ions metàl·lics en dissolució aquosa, bescanvi d'aigua: labilitat i inèrcia. Equilibris de formació de complexos metàl·lics en dissolució. Constants d'estabilitat. Sèrie d'Irwing-Williams. Efecte quelat. Cinètica i mecanisme de les reaccions de substitució de lligand en complexos quadrat pla i octaèdrics.
 - 5.1.2.- Reacciones redox: reaccions de transferència electrònica. Espontaneïtat de les reacciones redox: constants d'estabilitat i potencials redox. Mecanismes: esfera interna i esfera externa.
- 5.2.- Reaccions en química organometàl·lica i catàlisi. Tipus de reaccions: reaccions de dissociació i substitució de lligand. Reaccions d'addició oxidativa i eliminació reductiva. Reaccions d'inserció. Reaccions d'eliminació d'hidrurs. Ciclometal·lació. Principis de catàlisi. Processos catalítics: hidrogenació d'alquens. Hidroformilació. Procés Monsanto de síntesi d'àcid acètic. Procés Wacker (Smidt). Metàtesi d'olefines.

6. SÒLIDS INORGANICS: Defectes cristal·lins i no estequiometria

Imperficcions estructurals en els sòlids. Defectes puntuals. Dislocacions. Vector de Burger. Defectes superficials. Observació microscòpica dels defectes. No estequiometria: aspectes termodinàmics i estructurals.

7. Reactivitat dels sòlids

Difusió en sòlids. Lleis de la difusió. Factors que afecten a la difusió. Exemples.



VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	51,00	100
Tutories reglades	9,00	100
Estudi i treball autònom	70,00	0
Preparació d'activitats d'avaluació	20,00	0
TOTAL	150,00	

METODOLOGIA DOCENT

L'assignatura està plantejada perquè l'estudiant siga el protagonista del seu propi aprenentatge i es vertebrarà entorn de quatre eixos:

- **Classes teòriques participatives.**- En aquestes classes el professor donarà una visió global del tema objecte d'estudi fent especial recalcament en els conceptes claus o d'especial complexitat. S'indican aquells recursos més recomanables perquè complementen el tema en el temps d'estudi personal. El professor induirà a l'alumne a participar en les discussions que es plantejaran al llarg de l'exposició del tema.
- **Classes pràctiques i seminaris.**- En aquestes classes es durà a terme l'aplicació específica dels coneixements que els estudiants hagen adquirit en les classes de teoria. Els estudiants hauran de, prèviament, haver treballat els problemes que es van a resoldre. La resolució d'aquests problemes es durà a terme en algunes ocasions pel professor i en un altre cas pels alumnes bé en grup, bé de forma individualitzada.
- **Tutories.**- Els alumnes acudirán a elles en grups i seran d'una hora. En elles, el professor orientarà a l'alumne sobre els elements que conformen el procés d'aprenentatge, al mateix temps que avaluarà el seu procés d'aprenentatge d'una manera globalitzada. L'alumne rebrà una llista de preguntes i problemes que li serviran per a exercitar-se en cadascun dels aspectes tractats en les sessions de classe. Igualment, les tutories serviran per a resoldre tots els dubtes que hagen pogut sorgir al llarg de les classes i orientarà als estudiants sobre els mètodes de treball més útils per a la resolució dels problemes que se'ls pugen presentar.
- **Seminaris-Conferències:** Els Seminaris-Conferències versaran sobre aspectes complementaris de la seva formació en Química Inorgànica. Per a aquesta tasca, els estudiants assistiran a l'acte i contestaran un qüestionari preparat pel professor.

AVALUACIÓ

L'avaluació de l'aprenentatge dels estudiants tindrà en compte tots els aspectes exposats en l'apartat de Metodologia d'aquesta guia docent. L'assistència i complementació del qüestionari del Seminari-Conferència tindrà una equivalència d'una tutoria.



Els coneixements adquirits al llarg del curs s'avaluaran al final d'aquest. Per als alumnes que ho desitgen (opció A), aquest serà l'únic procediment de qualificació. Per aprovar s'exigirà una qualificació mínima de 5 (sobre 10).

Addicionalment, amb caràcter voluntari, es faran una o diverses avaluacions parcials que comprendran diferents parts del programa. Els alumnes que les aproven (nota de 5 o superior) no hauran d'examinar-se al final dels temes que ja han aprovat. La nota final serà la mitjana aritmètica de les notes que hagen obtingut. Per a aprovar serà necessari que aquesta nota siga igual o major que 5 (opció B). Els alumnes que no aproven les avaluacions parcials o que aspiren a millorar els resultats que hagen obtingut seran qualificats com s'indica en l'opció A. La qualificació de la segona convocatòria s'ajustarà a l'opció A.

REFERÈNCIES

Bàsiques

- Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G.; Inorganic Chemistry, ed. Pearson Prentice-Hall, 3^a edició, 2008. ISBN: 978-0-13-175553-6.
(En format separat, s'ha publicat el manual de respostes als exercicis plantejats. Existeix una traducció a l'espanyol de la 2^a edició i del manual de respostes d'Ed. Pearson Prentice-Hall, 2006.)
- Atkins, P. W.; Overton, T. L.; Rourke, J. P.; Weller, M. T. y Armstrong, F. A.; Shriver & Atkins: Inorganic Chemistry, ed. Oxford, 5^a edició, 2010. ISBN: 978-0-19-923617-6.
(Existeix una traducció al espanyol de la quarta edició de Ed. McGraw-Hill, 2008).
- Rayner-Canham, G.; Overton, T.; Descriptive Inorganic Chemistry y Student solutions manual for descriptive inorganic chemistry, ed. W. H. Freeman, 4^a edició, 2006. ISBN 10: 1-4292-1814-2.
(Existeix una traducció al espanyol de la 2^a edició de G. Rayner-Canham, Química Inorgànica Descriptiva, ed. Prentice Hall, 2000)
- Miessler, G. L.; Tarr, D. A., Inorganic Chemistry, 4^a edició, ed. Pearson/Prentice Hall, 2011. ISBN-13: 978-0136128663

Complementàries

- Cotton, F. A.; Wilkinson, G.; Murillo, C. A.; Bochmann, M.; Advanced Inorganic Chemistry, ed. Wiley-Interscience, 6^a edició, 1999. ISBN: 978-0-471-19957-1
Existeix una traducció al espanyol de la 4^a edició, F. A. Cotton y G. Wilkinson, Química Inorgànica Avanzada, ed. Limusa, 1987.
- Greenwood, N. N.; Earnshaw, A.; Chemistry of the Elements, ed. Elsevier Science, 2^a edició, 1997 (corregida en 1998, con reimpressiones en 2001 y 2002). ISBN: 0-7506-3365-4.
- Wells, F.; "Química Inorgànica Estructural", 4^a ed. Reverté, Barcelona, 1994. ISBN-13: 978-8429175240; ISBN-10: 8429175245



- Purcell, K. F. ; Kotz, J. C.; Inorganic Chemistry, Saunders, 1977 (existe traducción al castellano, editorial Reverté).
- A.R. West, Solid State Chemistry and Its Applications, ed. John Wiley & Sons, 1987 (edición corregida de la publicada en 1984). ISBN: 0 -471-9037709
- Greenwood, N. N.; Cristales iónicos, defectos reticulares y no estequiometría, 1ª ed. Madrid: ed. Alhambra, 1970. ISBN: N.A.