

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

<b>Codi</b>	34200
<b>Nom</b>	Química inorgànica III
<b>Cicle</b>	Grau
<b>Crèdits ECTS</b>	6.0
<b>Curs acadèmic</b>	2022 - 2023

**Titulació/titulacions**

<b>Titulació</b>	<b>Centre</b>	<b>Curs</b>	<b>Període</b>
1110 - Grau de Química	Facultat de Química	3	Primer quadrimestre

**Matèries**

<b>Titulació</b>	<b>Matèria</b>	<b>Caràcter</b>
1110 - Grau de Química	8 - Química Inorgànica	Obligatòria

**Coordinació**

<b>Nom</b>	<b>Departament</b>
GARCIA-ESPAÑA MONSONIS, ENRIQUE	320 - Química Inorgànica

**RESUM**

L'assignatura obligatòria Química Inorgànica III de 6 crèdits està inclosa en la matèria Química Inorgànica del mòdul Química Fonamental i s'imparteix en el sisè quadrimestre del Grau en Química. Després de l'estudi de la Química Inorgànica I i II, on s'han adquirit els coneixements bàsics de la matèria i s'han estudiat les propietats dels elements químics i els seus compostos, la Química Inorgànica III se centra en l'estudi dels compostos de coordinació i organometàl·lics.

Els compostos de coordinació i organometàl·lics juguen un important paper en la Química Inorgànica i representen una forma d'enfocar l'estudi d'aquesta matèria aplicable a una enorme varietat de sistemes. El seu estudi té caràcter integrador, aúna conceptes i teories amb fets experimentals i abasta des de l'estructura electrònica i molecular a la síntesi i reactivitat de les substàncies, termodinàmica i cinètica, estudis bàsics i aplicacions. Per la seua naturalesa, s'estén des de la Química Teòrica a la Bioquímica i en la Química Organometàlica es difuminen els límits convencionals entre la Química Inorgànica i la Química Orgànica. Les assignatura Química de Coordinació i Química Organometàlica completaran aquest estudi. Actualment, l'àrea de nous materials està avançant molt ràpidament i hi ha un marcat interès en la síntesi i les propietats dels sòlids inorgànics nous. El tema inclòs en l'assignatura Química Inorgànica III permetrà a l'alumne entendre conceptes bàsics dels sòlids i es complementarà amb l'assignatura obligatòria Ciència de Materials, 6 crèdits.



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

## CONEXEMENTS PREVIS

### Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació

1934 - Doble Grau en Química i Enginyeria Química :

1110 - Grau de Química :

1108 - Grau en Química :

1929 - Doble Grau en Física i Química :

### R4-OBLIGACIÓ D'HAVER SUPERAT PRÈVIAMENT L'ASSIGNATURA

34183 - Química general I

34184 - Química general II

34183 - Química general I

34184 - Química general II

34183 - Química general I

34184 - Química general II

34183 - Química general I

34184 - Química general II

### Altres tipus de requisits

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

## COMPETÈNCIES (RD 1393/2007) // RESULTATS DE L'APRENTATGE (RD 822/2021)

### 1110 - Grau de Química

- Desenvolupar capacitat d'anàlisi, síntesi i raonament crític.
- Demostrar capacitat inductiva i deductiva.
- 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 qualitatius 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 qualitatius i quantitius dels problemes químics.
- Desenvolupar metodologies sostenibles i respectuoses amb el medi ambient.
- Que els estudiants sàprien 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 puguen 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 D'APRENTATGE (RD 1393/2007) // SENSE CONTINGUT (RD 822/2021)**

L'apartat anterior recull les competències contingudes en el document VERIFICA. En aquesta assignatura s'aborden part dels resultats d'aprenentatge de la matèria Química Inorgànica III que permeten adquirir, tant coneixements específics de química, com habilitats i competències cognitives i competències generals recomanades per l'EUROPEAN CHEMISTRY THEMATIC NETWORK (ECTN) per al Chemistry EurobachelorÒ Label. A la següent taula es relacionen els resultats d'aprenentatge adquirits en l'assignatura de Química Inorgànica 3 relacionats amb les competències del grau en química

<b>CONEIXEMENTS ESPECÍFICS DE QUÍMICA</b>	
<b>El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:</b>	
	<b>Competències de l'assignatura Química Inorgànica III que contemplen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®</b>
Principals aspectes de la terminologia química, nomenclatura, convenis i unitats.	Demostrar que coneix els aspectes principals de terminologia química, nomenclatura, convenis i unitats.(CE1)
Els principals tipus de reaccions químiques i les principals característiques associades a elles.	Demostrar que coneix els tipus principals de reacció química i les seues característiques principals associades.(CE4)



Les principals tècniques de la recerca d'estructures incloent l'espectroscòpia.	Demostrar que reconeix els elements químics i els seus compostos: obtenció, estructura, reactivitat, propietats i aplicacions.(CE7).
	Demostrar que coneix l'estructura i la reactivitat de les classes principals de biomolècules i la química dels processos biològics principals.(CE12).
	Manejar la instrumentació química utilitzada en les diferents àrees de la Química.(CE19).
	Demostrar que coneix els principis, els procediments i les tècniques per a la determinació, la separació, la identificació i la caracterització de compostos químics. (CE8)
Els principis de la termodinàmica i la seva aplicació a la química.	Demostrar que coneix els principis de termodinàmica i cinètica i les seues aplicacions en química.(CE6).
Els principis de la mecànica quàntica i la seva aplicació a la descripció de l'estructura i propietats dels àtoms i molècules.	Demostrar que coneix els principis de la mecànica quàntica i l'aplicació a la descripció de l'estructura i de les propietats d'àtoms i molècules.(CE5).
La cinètica del canvi químic, inclosa la catàlisi; la interpretació mecànica de les reaccions químiques.	Demostrar que coneix els principis de termodinàmica i cinètica i les seues aplicacions en química.(CE6).
Els trets estructurals dels elements químics i els seus compostos incloent l'estereoquímica.	Demostrar que reconeix els elements químics i els seus compostos: obtenció, estructura, reactivitat, propietats i aplicacions.(CE7).
	Relacionar les propietats macroscòpiques i propietats d'àtoms i molècules individuals, incloent-hi macromolècules (naturals i sintètiques), polímers, col·loides i altres



	materials.(CE11).
	Demostrar que coneix l'estructura i la reactivitat de les classes principals de biomolècules i la química dels processos biològics principals.(CE12).
L'estructura i reactivitat d'importants tipus de biomolècules i la química d'importants processos biològics.	Demostrar que coneix l'estructura i la reactivitat de les classes principals de biomolècules i la química dels processos biològics principals.(CE12).
	Relacionar la química amb altres disciplines.(CE26).

**COMPETÈNCIES I HABILITATS COGNITIVES****El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:**

	<b>Competències de l'assignatura Química Inorgànica 3 que contempnen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®</b>
Capacitat per a demostrar coneixement i comprensió dels fets, conceptes, principis i teories fonamentals relacionades amb els temes esmentats anteriorment.	Demostrar el coneixement i la comprensió dels fets essencials, dels conceptes, dels principis i de les teories relacionades amb les àrees de la química.(CE13).
Capacitat per a aplicar aquest coneixement i comprensió a la solució de problemes comuns qualitius i quantitius.	Resoldre problemes qualitius i quantitius segons models desenvolupats prèviament.(CE14).
	Reconèixer i analitzar problemes nous i planejar estratègies per solucionar-los.(CE15).
	Comprendre els aspectes qualitius i



	quantitatius dels problemes químics.(CE24).
COMPETÈNCIES GENERALS	
<b>El procés d'aprenentatge ha de permetre als titulats de grau demostrar:</b>	
	<b>Competències de l'assignatura Química Inorgànica 3 que contemplen els resultats d'aprenentatge EUROBACHELOR®</b>
Capacitat per a aplicar coneixement pràctic per a la resolució de problemes relacionats amb informació qualitativa i quantitativa.	Resoldre problemes de forma efectiva.(CG4).
	Resoldre problemes qualitius i quantitatius segons models desenvolupats prèviament.(CE14).
	Relacionar teoria i experimentació.(CE22).
	Reconèixer i valorar els processos químics en la vida diària.(CE23).
	Comprendre els aspectes qualitius i quantitatius dels problemes químics.(CE24).

## DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

### 1. Simetria Molecular

- 1.1.- Elements i operacions de simetria.
- 1.2.- Grups puntuals de simetria. Determinació del grup puntual de simetria d'una molècula. Grups puntuals C<sub>4v</sub>, D<sub>3h</sub>, D<sub>4h</sub> T<sub>d</sub> i O<sub>h</sub>.
- 1.3.- Taules de caràcters. Espècies de simetria. Simetria dels orbitals atòmics.
- 1.4.- Aplicació de la simetria. Quiralitat, vibracions moleculars. Espectres IR i RAMAN: molècula d'H<sub>2</sub>O, vibracions de tensió de grups carbonil en carbonils metàl·lics. Determinació d'orbitals de grup en complexos octaèdrics.



## 2. Compostos de coordinació i organometàlics dels metalls de transició

- 2.1.- Aspectes històrics: Alfred Werner i el seu temps. Definició de compost de coordinació.
- 2.2.- 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.
- 2.3.- Tipus de lligands. Classificació: naturalesa de l'àtom donador, denticidad, naturalesa de l'enllaç metall-ligant, lligands en química organometàl·lica.
- 2.4.- Isomeria en compuestos de coordinació.

## 3. Naturalesa del enllaç i estructura electrònica

- 3.1- Introducció. Teoria de l'enllaç de valència: complexos d'alt i baix spin.
- 3.2.-Teoria del camp cristal·lí. Factors que afecten a l'energia d'estabilització de camp cristal·lí. Complexos octaèdrics, complexos de camp feble i fort. Complexos tetraèdrics. Efecte Jahn-Teller. Complexos quadrats.
- 3.3.- Teoria de l'orbital molecular. Diagrama d'orbitals moleculars i configuració electrònica dels complexos octaèdrics, tetraèdrics, quadrats. Model de l'solapament angular. Diagrames de desdoblament energètic dels orbitals d en complexos de diferent simetria.
- 3.4.- Termes i nivells energètics. Transicions d-d en compostos de coordinació. Diagrames de Tanabe-Sugano

## 4. Reaccions dels complexos metàl·lics: Aspectes termodinàmics i cinètics dels compostos de coordinació.

- 4.1. Estabilitat dels compostos de coordinació. Constants d'estabilitat: constants globals i successives. Determinació de constants d'estabilitat. Correlacions d'estabilitat. Efecte estadístic. Efecte quelat. Efecte macrocíclic. Efecte criptato. Selectivitat.
- 4.2.-Reaccions i mecanismes en química de coordinació. Introducció. Reaccions de substitució de lligant. Ions metàl·lics en dissolució aquosa; reaccions de bescanvi d'aigua: ions làbils i inerts. Mecanisme de les reaccions de substitució de lligant: dissociació, intercanvi i associació. Reaccions de substitució de lligant en complexos octaèdrics. Evidències experimentals per a mecanismes dissociatius en complexos octaèdrics. Mecanismes associatius en complexos octaèdrics. El mecanisme de la base conjugada. Aspectes cinètics de l'efecte quelat. Esteroquímica de les reaccions. Reaccions de substitució de lligant en complexos quadrats. Efecte trans. Reaccions redox: mecanismes d'esfera externa i esfera interna.
- 4.3.- Reaccions en química organometàl·lica i catàlisi. Tipus de reaccions: Reaccions de dissociació i substitució de lligant. Reaccions d'addició oxidativa i eliminació reductiva. Reaccions d'inserció. Reaccions d'eliminació de hidrurs. Ciclometalació. Principis de catàlisi. Exemples de processos catalítics en la indústria química





## 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
<b>TOTAL</b>	<b>150,00</b>	

## 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 recalcamen 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 es farà tenint en compte tots els aspectes exposats en l'apartat de metodologia d'aquesta guia docent. Els coneixements adquirits al llarg de el curs s'avaluaran tenint en compte tant l'activitat dels estudiants al llarg de el curs, com mitjançant un examen final presencial. El percentatge de qualificació atribuït a ambdues modalitats serà: avaluació contínua 30%, examen final 70%. S'exigirà un qualificació mínima de 4.5 en el examen final per a comptabilitzar la part d'avaluació contínua. En el cas que les circumstàncies sanitàries impedissin la realització de l'examen final de forma presencial, l'examen seria realitzat per via telemàtica fent ús de les facilitats ofertes



per l'Aula Virtual. Quan sigui necessari s'obre la possibilitat de realitzar una entrevista amb algun estudiant.

## REFERÈNCIES

### Bàsiques

- Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G.; Inorganic Chemistry, ed. Pearson Prentice-Hall, 3<sup>a</sup> 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<sup>a</sup> 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<sup>a</sup> 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<sup>a</sup> edició, 2006. ISBN 10: 1-4292-1814-2.  
(Existeix una traducció al espanyol de la 2<sup>a</sup> edició de G. Rayner-Canham, Química Inorgànica Descriptiva, ed. Prentice Hall, 2000)
- Miessler, G. L.; Tarr, D. A., Inorganic Chemistry, 4<sup>a</sup> edició, ed. Pearson/Prentice Hall, 2011. ISBN-13: 978-0136128663
- Smart, L., Moore, E., Química del estado sólido. Una introducción. Addison-Wesley Iberoamericana, Wilmington, 1995.
- J. E. Huheey, E. A. Keiter, R. L. Keiter, Inorganic chemistry: principles of structure and reactivity, 4th ed

### Complementàries

- Cotton, F. A.; Wilkinson, G.; Murillo, C. A.; Bochmann, M.; Advanced Inorganic Chemistry, ed. Wiley-Interscience, 6<sup>a</sup> edició, 1999. ISBN: 978-0-471-19957-1  
Existeix una traducció al espanyol de la 4<sup>a</sup> 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<sup>a</sup> edició, 1997 (corregida en 1998, con reimpressiones en 2001 y 2002). ISBN: 0-7506-3365-4.
- Purcell, K. F.; Kotz, J. C.; Inorganic Chemistry, Saunders, 1977 (existe traducció al castellano, editorial Reverté).