FITXA IDENTIFICATIVA

Dades de l'Assignatura

Codi	34221
Nom	Química de la coordinació i química organometàl·lica
Cicle	Grau
Crèdits ECTS	4.5
Curs acadèmic	2015 - 2016

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
1108 - Grau de Química	Facultat de Química	4	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
1108 - Grau de Química	16 - Química Inorgànica Aplicada	Optativa

Coordinació

Nom	Departament
FAUS PAYA, JUAN	320 - Química Inorgànica

RESUM

El propòsit d'aquesta assignatura optativa és completar els coneixements sobre química de coordinació i organometàl·lica adquirits el curs anterior en l'assignatura obligatòria de "Química inorgànica III". L'estudi se centra en l'estructura electrònica dels complexos dels metalls de transició, tant en els aspectes teòrics (teoria del camp cristal·lí) com experimentals (espectres d'absorció, propietats magnètiques i espectres de ressonància paramagnètica electrònica) així com en els espectres vibracionals (infraroig i Raman).

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

Es recomana haver cursat i superat satisfactòriament totes les assignatures dels cursos anteriors.

COMPETÈNCIES

1108 - Grau de Química

- Adquirir una sensibilitat permanent per la qualitat i el medi ambient, el desenvolupament sostenible i la prevenció de riscos laborals.
- Interpretar la variació de les propietats característiques dels elements químics segons la taula periòdica.
- Demostrar que coneix les característiques i el comportament dels diferents estats de la matèria i les teories usades per descriure'ls.
- 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.
- Demostrar que reconeix els elements químics i els seus compostos: obtenció, estructura, reactivitat, propietats i aplicacions.
- Relacionar les propietats macroscòpiques i propietats d'àtoms i molècules individuals, incloent-hi macromolècules (naturals i sintètiques), polímers, col·loides i altres materials.
- Demostrar que coneix l'estructura i la reactivitat de les classes principals de biomolècules i la química dels processos biològics principals.
- Manipular amb seguretat els productes químics.
- Dur a terme procediments experimentals estàndards interessats en treballs analítics i sintètics, en relació amb sistemes orgànics i inorgànics.
- Relacionar la química amb altres disciplines.
- 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'arreplegar 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.

RESULTATS DE L'APRENENTATGE

Comprensió i assimilació de tots els conceptes introduïts en cadascun dels temes del programa que es descriu amb detall més avall. Familiarització amb els resultats dels càlculs teòrics de l'estructura electrònica dels ions lliures dels metalls de transició i dels seus complexos. Capacitat per aplicar els coneixements adquirits per interpretar les dades experimentals de qualsevol de les tècniques estudiades d'un complex desconegut prèviament i de predir les propietats espectrals i magnètiques d'un complex donat.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Estructura electrònica dels àtoms i ions lliures dels metalls de transició.

1.1. Aproximació monoelectrònica: configuracions electròniques.
1.2. Repulsió interelectrònica: termes energètics. Càlcul dels termes d'una configuració dx: mètode de factorització d'espín. Energia relativa dels termes: paràmetres de Racah.
1.3. Adaptació espín-òrbita: nivells denergia.
1.4. Efecte d'un camp magnètic extern sobre els nivells d'energia d'un ió metàl·lic de transició: propietats magnètiques.

2. Estructura electrònica dels complexos dels metalls de transició

2.1.- Teoria del camp cristal·lí. Complexos octaèdrics, tetraèdrics i quadrats.
2.2.- Aproximació de camp fort: configuracions electròniques. Comparació amb la teoria d'orbitals moleculars.
2.3.- Aproximació de camp dèbil: termes energètics. Diagrames dOrgel. Diagrames de Tanabe i Sugano.
2.4.- Adaptament spin-òrbita: nivells d'energia.

3. Espectres electrònics

3.1.- Estats excitats i espectres d'absorció electrònics. Transicions d-d. Característiques dels espectres d'absorció en el visible: número, posició, amplària i intensitat de les bandes d'absorció.
3.2.- Intensitat de les bandes d'absorció. Regles de selecció: Transicions d'espín permés i d'espín prohibit. Regla de selecció de Laporte.
3.3.- Transicions electròniques d'espín permés. Anàlisi de lespectre d'absorció en el visible dels complexos octaèdrics i tetraèdrics dels metalls de transició. Transicions d'espín prohibit: espectre dabsorció de l'ió [Mn(H2O)6]2+

4. Propietats magnètiques

4.1. Estudi comparatiu del moment magnètic dels complexos i dels ions metàl·lics lliures. Fórmula d'espín sol: nombre d'electrons desaparellats.
4.2. Propietats magnètiques dels complexos amb simetria cúbica (octaèdrics i tetraèdrics). Efecte del camp cristal·lí sobre el moment magnètic d'un ió lliure: bloqueig parcial o total de la contribució orbital al moment magnètic. Termes A, E i T.
4.3. Adaptació espín-òrbita i propietats magnètiques. Termes A2 i E: adaptació espín-òrbita de segon ordre i contribució orbital al moment magnètic. Termes T: diagrames de Kotani.
4.4. Propietats magnètiques de complexos amb menor simetria (simetria axial). Anisotropia magnètica.
4.5. Introducció a l'espectroscòpia de ressonància paramagnètica electrònica (EPR). Complexos de Cu(II).

5. Introducció a la química organometàl·lica

5.1. Lligants en química organometàl·lica. Carbonils. Lligants semblants al CO. Complexos dhidrur i dihidrogen. Altres molècules petites.
5.2. Enllaç entre àtoms metàl·lics i sistemes orgànics. Sistemes lineals. Sistemes cíclics.
5.3. Complexos que contenen enllaços metall-carboni senzills, dobles i triples: alquils i complexos semblants. Carbens i carbins.
5.4. Compostos amb enllaços múltiple metall-metall.

6. Reactivitat dels compostos organometàl·lics

6.1. Reaccions que impliquen pèrdua o guany de lligants. Reaccions daddició oxidant i eliminació reductora.
6.2. Reaccions de modificació de lligants coordinats. Reaccions dinserció. Reaccions daddició i eliminació nucleofílica i electrofílica.
6.3. Reaccions de radicals lliures amb complexos metàl·lics.

7. Aplicacions en catàlisi.

7.1. Diversos tipus de catàlisi per mitjà de compostos organometàl·lics.
7.2. Processos catalítics més importants des del punt de vista industrial.
7.3. Reaccions dadaptació.
7.4. Catàlisi asimètrica.
7.5. Aplicacions en síntesi orgànica.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	38,00	100
Tutories reglades	7,00	100
Estudi i treball autònom	47,50	0
Preparació d'activitats d'avaluació	20,00	0
TOTAL	**112,50**	

METODOLOGIA DOCENT

L'assignatura està plantejada perquè l'estudiant siga el protagonista del seu propi aprenentatge i s'estructura de la manera següent:

Classes expositives. En aquestes classes, el professor donarà una visió general del tema objecte d'estudi posant una insistència especial en els aspectes nous o d'especial complexitat. També es durà a terme l'aplicació específica dels coneixements que els estudiants hagen adquirit per mitjà de la resolució de qüestions i problemes pràctics que els alumnes hagen treballat prèviament. Lògicament, aquestes classes es complementen amb el temps d'estudi personal.

Tutories grupals. Els alumnes hi acudiran en grups reduïts. En aquestes, el professor pot proposar diverses activitats, com a resolució de qüestions o problemes plantejats, resolució de dubtes, plantejament de discussions, etc., que podran contribuir a la qualificació final ho considera el professor.

AVALUACIÓ

Els coneixements adquirits al llarg del curs s'avaluaran al final. 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, i amb caràcter voluntari, es realitzarà una avaluació parcial que comprendrà la primera meitat del programa. Els alumnes que la superen (nota de 5 o superior) no s'hauran d'examinar al final dels temes ja aprovats. La nota final serà la mitjana aritmètica de les qualificacions obtingudes. Per aprovar, serà necessari que aquesta nota siga igual o major que 5 (opció B). Els alumnes que no superen la avaluació parcial o que aspiren a millorar els resultats obtinguts seran qualificats com s'indica en l'opció A. La qualificació de la segona convocatòria s'ajustarà a l'opció A.

REFERÈNCIES

Bàsiques

- Kettle,S. F. A. Physical Inorganic Chemistry. A Coordination Chemistry Approach. Spektrum Academic Publishers, Oxford, 1996. ISBN: 978-0-7167-4514-3
- Ribas Gispert,J. Química de Coordinación, Edicions de la Universitat de Barcelona/Ediciones Omega, 2000. ISBN: 9788428212106
  Existe una versión más reciente en inglés:
  Ribas Gispert,J. Coordination Chemistry, Wiley-VCH, 2008. ISBN-13 978-3-527-31802-5
- Crabtree,R.H.; Peris,E. Química Organometálica de los Metales de Transición, Castellón, Biblioteca Univ. Jaume I, 1997. ISBN: 84-8021-164-2
- Elschenbroich,C. Organometallics, 3rd. Ed., Ed. WILEY-VCH, 2005.ISBN: 3-527-29390-6

Complementàries

- Gerloch,M. Orbitals, Terms and States, 1ª Ed. Wiley, 1986. ISBN-13: 978-0471909354
- Figgis,B. N.; Hitchman, M. A. Ligand field theory and its applications, New York: Wiley-VCH, 2000. ISBN 0.471-31776-4
- Braterman,P.S. Spectra and Bonding in Metal Carbonyls. Part B: Spectra and Their Interpretation, en Mingos, D. M. P. (ed), Structure and Bonding, Vol 26, p. 1-42, Springer, 1976.
- Crabtree,R. H. The Organometallic Chemistry of the Transition Metals, 5th Ed., Ed. Wiley Interscience John Wiley and Sons, 2009.ISBN: 978-0-470-25762-3
- Astruc,D. Química Organometálica, ¡ª Ed. Barcelona: Ed. Reverté, 2003. ISBN: 84-291-7007-3